

## 《物理化学实验(2)》课程教学大纲

### 一、课程基本信息

- 1、课程代码：
- 2、课程名称：物理化学实验(2) (计算化学)
- 3、学时/学分：48 学时/1.5 学分
- 4、先修课程：化学原理，物理化学(2)，数学分析或高等数学、物理学导论或大学物理。
- 5、面向对象：致远荣誉计划化学方向

### 二、课程性质和任务

计算化学在原子、分子水平上阐明化学问题的本质，在创造特殊性能的新材料、新物质方面发挥着重要作用。计算和模拟已经渗入到化学学科的各个方面，影响和改变化学学科的发展，成为继实验研究和理论研究后的第三种科研方法。物理化学课程中量子化学理论、原子分子结构以及统计热力学理论部分可以通过本课程得到具体体现。本课程主要通过上机操作实验，学习软件使用，辅以理论讲解，加深对物理化学中相关内容的理解和认识，初步掌握计算化学的理论和方法。

### 三、教学内容和基本要求

本课程分类 6 章。第 1 章介绍量子化学计算的基础知识；第 2 和 3 章分析原子、分子的电子结构；第 4 章包括分子的结构优化和性质计算；第 5 章研究分子间弱相互作用；第 6 章结合统计热力学和量子化学计算理想气体分子的热力学性质（内能、熵、自由能）。所涉及的知识涵盖物理化学课程中原子分子结构、热力学以及统计热力学部分的内容。要求学生初步掌握量子化学计算的基本理论和方法，并通过计算讨论、说明、理解和预测原子分子的物理化学性质。

#### 教学内容如下：

#### 第一章 量子化学计算方法、基组

- 1、 分子轨道理论和密度泛函理论基础
- 2、 基组的概念，Slater 基组和 Gauss 基组
- 3、 量子化学软件（Gaussian）的使用

#### 第二章 原子的电子结构计算

- 1、 原子的电子结构分析
- 2、 电子轨道图形和电子云密度
- 3、 基组的影响
- 4、 亲和能和电离势

#### 第三章 双原子分子的电子结构计算

- 1、 双原子分子的电子结构
- 2、 分子轨道的组成、能级
- 3、 分子轨道的形状和电子云密度
- 4、 分子光谱
- 5、 基组的影响

#### 第四章 分子的结构优化和性质计算

- 1、 分子结构优化
- 2、 HF、MP2、CCSD (T)、DFT 方法比较

- 3、 分子的电荷分布、偶极矩和多极矩
- 4、 简正模式、红外和拉曼光谱频率
- 5、 屏蔽因子计算
- 6、 分子构型扫描
- 7、 前线轨道和反应机理

#### 第五章 分子间弱相互作用计算

- 1、 范德华相互作用
- 2、 氢键相互作用

#### 第六章 理想气体分子的热力学性质和溶剂化效应

- 1、 统计热力学基础复习
- 2、 理想气体分子内能、熵和自由能的计算
- 3、 溶剂化效应

### 四、教学进度安排

|     |      |        |                            |
|-----|------|--------|----------------------------|
| 第一周 | 第一次课 | 1-2 节课 | 分子轨道理论和 HF 方法              |
|     |      | 3-4 节课 | Slater 基组和 Gauss 基组        |
|     |      | 5-6 节课 | 原子轨道和电子云密度                 |
|     | 第二次课 | 1-2 节课 | 双原子分子的分子轨道                 |
|     |      | 3-4 节课 | 亲和能、电离势、光谱项                |
|     |      | 5-6 节课 | 综合练习：基组对原子、分子轨道的影响         |
| 第二周 | 第一次课 | 1-2 节课 | MP2 方法、CCSD (T) 及 DFT 理论介绍 |
|     |      | 3-4 节课 | 多原子分子结构优化                  |
|     |      | 5-6 节课 | 方法、基组对分子轨道、结构及能量的影响        |
|     | 第二次课 | 1-2 节课 | 频率计算及简正模式、红外和拉曼光谱          |
|     |      | 3-4 节课 | 分子的电荷分布、偶极矩和多极矩            |
|     |      | 5-6 节课 | 综合练习：运用计算化学说明和理解化学现象       |
| 第三周 | 第一次课 | 1-2 节课 | 屏蔽因子计算                     |
|     |      | 3-4 节课 | 分子构型扫描                     |
|     |      | 5-6 节课 | 前线轨道和反应机理                  |
|     | 第二次课 | 1-2 节课 | 分子间弱相互作用能的计算               |
|     |      | 3-6 节课 | 综合练习：分子间弱相互作用              |
|     |      |        |                            |
| 第四周 | 第一次课 | 1-2 节课 | 统计热力学基础复习                  |
|     |      | 3-6 节课 | 零点能、内能、熵和自由能的计算            |
|     | 第二次课 | 1-2 节课 | 溶剂化效应                      |
|     |      | 3-6 节课 | 综合练习：化学变化的熵、焓及自由能变         |

### 五、教学设计

本课程以学生上机操作为主，穿插必要的理论讲解。上机练习分为两部分：一是实例练习部分，为在老师演示完后，学生进行必要的简单的熟悉操作的练习；二是综合练习部分，每周一次，学生运用学到的知识去解决一些相对独立的问题，最后提交报告。

## 六、课程考核及说明

成绩 100%，4 次报告各占 25%。

## 七、教学参考书：

《量子化学-基本原理和从头计算法》上册、中册，主编：徐光宪、黎乐民、王德民，科学出版社

《Exploring Chemistry with Electronic Structure Method》James B. Foresman, Aeleen Frisch.

《Gaussian 03 中文用户参考手册》

撰写人：孙淮、曹风雷

院（系）公章：

院（系）教学主管签字（盖章）：

时 间：