

# **КВАНТОВАЯ ХИМИЯ**

**(строение вещества, химическая связь)**

**Квантовая химия** — это раздел теоретической химии, рассматривающий строение и свойства химических соединений, реакционную способность, кинетику и механизмы химических реакций на основе квантовой механики.

**Квантовая механика** изучает состояния микрочастиц и их систем (элементарных частиц, молекул и др.), изменение этих состояний во времени, а также связь величин, характеризующих состояния микрочастиц, с экспериментальными макроскопическими величинами.

**Квантовая механика** — раздел теоретической физики, описывающий физические явления, в которых действие сравнимо по величине с постоянной Планка.

# 1. Область применения

**Анализ электронного строения молекул позволил интерпретировать различные типы химических связей, многие понятия классической теории химического строения и химической кинетики, такие как валентность, сопряжение и сверхсопряжение, энергия активации химической реакции и др.**

**На начальных этапах развития квантовой химии были введены новые понятия - гибридизация атомных орбиталей, трехцентровые связи, спин-орбитальное взаимодействие, электроотрицательность атомов, порядки связей, индексы реакционной способности и др.**

## **2. Область применения**

**Квантовая химия позволяет рассчитывать с высокой точностью равновесные межъядерные расстояния и валентные углы, энергии химических связей, барьеры внутреннего вращения и барьеры перехода между различными конформациями молекул, а также энергии активации простейших химических реакций.**

**На основе квантовой химии разработана теория электронных спектров поглощения и люминесценции молекул.**

**Квантовая теория способствовала внедрению в химию таких физических методов исследования, как ЭПР и ЯМР, и значительно облегчила интерпретацию экспериментальных результатов.**

### **3. Область применения**

**Квантовая химия применяется в материаловедении для направленного создания материалов с заданными электрическими и магнитными свойствами.**

**Методы квантовой химии используются для описания свойств и поиска новых материалов для наноэлектроники и наномедицины.**

**Методы квантовой химии применяются в молекулярной биологии, например, для расчета моделей биологических мембран, моделирования работы мышцы и др.**

# **Основные направления квантовой химии**

- 1. Квантовая теория строения и свойств молекул.**
- 2. Квантовая теория химических связей и межмолекулярных взаимодействий.**
- 3. Квантовая теория химических реакций и реакционной способности .**
- 4. Квантовая химия наноматериалов**
- 5. Квантовая биохимия и молекулярная биология**

# План курса

**Модуль I. Элементы теории строения вещества**

**Контрольная работа (20 баллов)**

**Модуль 2. Основы квантовой механики молекул**

**Контрольная работа (20 баллов)**

**Модуль 3. Основные методы квантовой химии**

**Контрольная работа (20 баллов)**

**Экзамен (40 баллов)**

# **Основные темы**

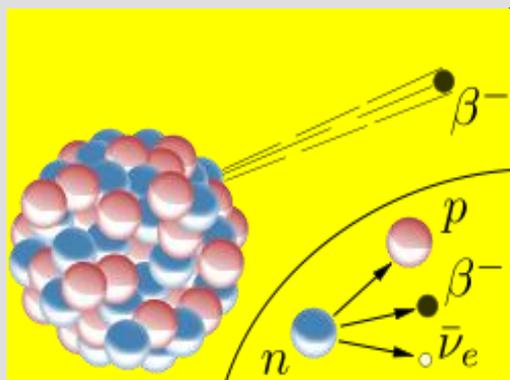
- 1. Элементарные частицы и атомное ядро.**
- 2. Электрические свойства атомов и малых молекул.**
- 3. Основы квантовой механики. Решение модельных задач.**
- 4. Адиабатическое приближение в теории молекул.**
- 5. Вариационный принцип и метод молекулярных орбиталей.**
- 6. Метод Хюккеля и приближение Хартри-Фока.**
- 7. Метод валентных связей.**
- 8. Электронная корреляция.**

# Методы описания

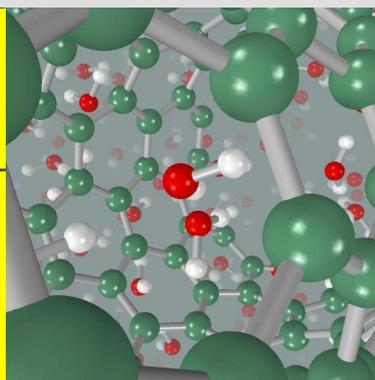


# КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

Квантовая химия математически описывает фундаментальное поведение материи на молекулярном масштабе



$\leq 10^{-15} \text{ м}$



$10^{-10} - 10^{-8} \text{ м}$



$0,5 \text{ м}$



$10^{21} \text{ м}$

# Основы описания строения вещества

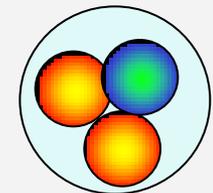
1. Поиск структурных элементов, из которых состоит вещество

2. Уровни организации атомных и субатомных частиц

3. Фундаментальные константы

Скорость света в вакууме  $c=3.00 \times 10^8$  м/сек

Постоянная планка  $h=6.63 \times 10^{-34}$  Дж×с



${}^3\text{He}$

4. Элементарные частицы (электрон, протон, нейтрон и др.)

$$R \leq 10^{-13} \text{ см}$$

$$E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - v^2 / c^2}} = pc^2 / v, \quad p = \frac{m_0 v}{\sqrt{1 - v^2 / c^2}}$$

# Элементарные частицы – фундаментальные составляющие материальных объектов

Первой открытой элементарной частицей был **электрон**–носитель элементарного электрического заряда. Электрон ( $e^-$ ) имеет массу  $m_e=9.11\times 10^{-28}$  г и размеры  $\leq 10^{-16}$  см. Заряд электрона отрицательный, равный по абсолютной величине  $e= 4.8\times 10^{-10}$  СГСЭ ( $1.6 \times 10^{-19}$  Кл)

Элементарная частица **протон** представляет собой ядро атома водорода. Протон ( $p$ ) имеет положительный заряд  $e$ , и массу  $m_p$  равную  $1.67 \times 10^{-24}$  г (~1840 масс электрона). Частица приблизительно такой же массы, но имеющая нулевой заряд получила название **нейтрон** ( $n$ ).

**Мюоны** ( $\mu^+$ ,  $\mu^-$ ), **пионы** ( $\pi^+$ ,  $\pi^-$ ), **нейтрино** ( $\nu$ ), **резонансы**, античастицы: **позитрон** ( $e^+$ ), **антипротон** и др. Античастицы существуют для всех частиц кроме фотона



**Возможность рождения и уничтожения частиц в процессах их столкновений и самопроизвольного распада является одним из главных свойств элементарных частиц.**

# Классификация элементарных частиц

Четыре вида взаимодействий элементарных частиц:  
**сильное, электромагнитное, слабое и гравитационное**

Сильные взаимодействия осуществляются между частицами, которые называются **адронами**. Переносчики взаимодействия - **глюоны**.



Частицы не вступающие в сильные взаимодействия называются **лептонами**. Каждому заряженному лептону (электрон, мюон и **тау частица**) соответствует нейтральная частица нейтрино- электронное, мюонное или тау-нейтрино. Общее число лептонов равно 12.

## **Кварки и стандартная модель**

Адроны состоят из более фундаментальных частиц – **кварков**, имеющих дробный электрический заряд, кратный  $e/3$ , и размеры меньше  $0,5 \times 10^{-19}$  м. Кварки существуют только внутри адронов и не наблюдаются как изолированные частицы. Различают 6 типов кварков.

### **Стандартная модель:**

Все вещество состоит из 12 фундаментальных частиц – 6 лептонов и 6 кварков.

Кварки участвуют в сильных, слабых и электромагнитных взаимодействиях; заряженные лептоны – в слабых и электромагнитных; нейтрино – только в слабых взаимодействиях.