

# КВАНТОВА ХІМІЯ

(Будова речовини, хімічний зв'язок)

**Квантова хімія** - це розділ теоретичної хімії, який розглядає будову і властивості хімічних сполук, реакційну здатність, кінетику і механізми хімічних реакцій на основі квантової механіки.

**Квантова механіка** вивчає стан мікрочастинок і їх систем (Елементарних частинок, молекул та ін.), зміну цих станів в часі, а також зв'язок величин, що характеризують стани мікрочастинок, з експериментальними макроскопічними величинами.

**Квантова механіка** - розділ теоретичної фізики, описує фізичні явища, в яких дія порівняна за величиною з постійною Планка.

# 1. Область застосування

Аналіз електронної будови молекул дозволяє інтерпретувати різні типи хімічних зв'язків, багато понять класичної теорії хімічної будови і хімічної кінетики, такі як валентність, сполучення і надсполучення, енергія активації хімічної реакції і ін.

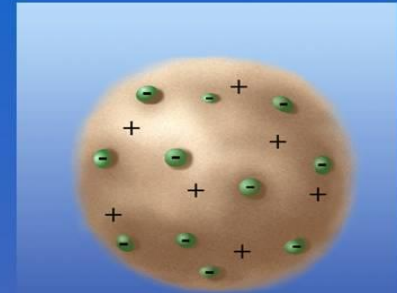
На початкових етапах розвитку квантової хімії були введені нові поняття - гібридизація атомних орбіталей, трицентровий зв'язок, спин-орбітальна взаємодія, електронегативність атомів, порядки зв'язків, індекси реакційної здатності та ін.

# Історичний розвиток уявлення про будову атома

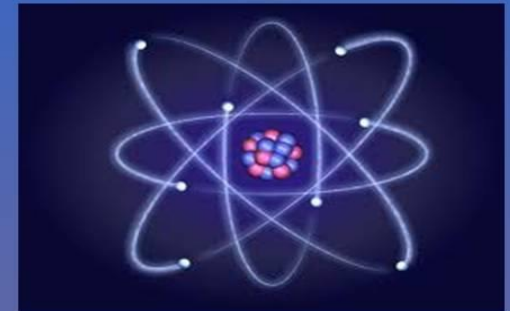
## Теорії будови атома



Гіпотеза Дж.Томсона 1904 р.  
«Теорія пудинга»



Планетарна модель атома  
Е.Резерфорда 1911р.



Квантові постулати  
Н. Бора



1.  $E=0$



2.  $E>0$



## 2. Область застосування

Квантова хімія дозволяє розраховувати з високою точністю рівноважні міжядерні відстані і валентні кути, енергії хімічних зв'язків, бар'єри внутрішнього обертання і бар'єри переходу між різними конформаціями молекул, а також енергії активації

найпростіших хімічних реакцій.

На основі квантової хімії розроблена теорія електронних спектрів поглинання і люмінесценції молекул.

Квантова теорія сприяла впровадженню в хімію таких фізичних методів дослідження, як ЕПР і ЯМР, і значно полегшила інтерпретацію експериментальних результатів.

### 3. Область застосування

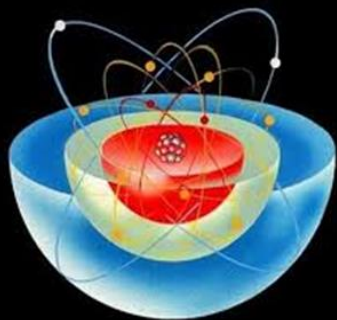
**Квантова хімія застосовується** в матеріалознавстві для спрямованого створення матеріалів із заданими електричними і магнітними властивостями.

**Методи квантової хімії використовуються** для опису властивостей і пошуку нових матеріалів для наноелектроніки і наномедицини.

**Методи квантової хімії застосовуються** в молекулярній біології, наприклад, для розрахунку моделей біологічних мембран, моделювання роботи м'язів і ін.

# Основні напрямки квантової хімії

- 1. Квантова теорія будови і властивостей молекул.
- 2. Квантова теорія хімічних зв'язків і міжмолекулярних взаємодій.
- 3. Квантова теорія хімічних реакцій і реакційної здатності.
- 4. Квантова хімія наноматеріалів.
- 5. Квантова біохімія і молекулярна біологія



# Методи опису

Релятивістська  
механіка

Релятивістська квантова  
механіка

$v/c$

Механіка

Квантова механіка

$\hbar/2S$



# КВАНТОВА ХІМІЯ

Квантова хімія математично описує фундаментальну поведінку матерії на молекулярному рівні



$\leq 10^{-15}$  м

$10^{-10} - 10^{-8}$  м

0,5 м

$10^{21}$  м



# Основи опису будови речовини

1. Пошук структурних елементів, з яких складається речовина

2. Рівні організації атомних і субатомних частинок

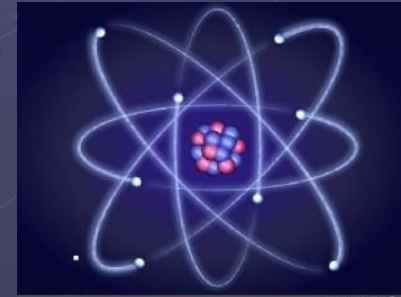
3. Фундаментальні константи

Швидкість світла у вакуумі  $c = 3.00 \times 10^8$  м/сек

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

4. Елементарні частинки (електрон, протон, нейтрон)

$$R \leq 10^{-13} \text{ см}$$



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

# Елементарні частинки – фундаментальні складові матеріальних об'єктів

Першою відкритою елементарною частинкою був **електрон (e)** - носій елементарного електричного заряду.

$$m_e = 9.11 \times 10^{-28} \text{ г}$$

$$r \leq 10^{-16} \text{ см.}$$

$$e = 4.8 \times 10^{-10} \text{ СГСЕ (} 1.6 \times 10^{-19} \text{ Кл)}$$

Елементарна частинка **протон (p)** - ядро атома водню.

- позитивний заряд  $e$ ,
- $m_p = 1.67 \times 10^{-24} \text{ г}$  ( $\sim 1840$  мас електрона).

Частка такої ж маси, але з нульовим зарядом - **нейтрон (n)**.

**Мюони ( $\mu^+$ ,  $\mu^-$ ), піони ( $\pi^+$ ,  $\pi^-$ ), нейтрино ( $\nu$ ), резонанси, античастинки: позитрон ( $e^+$ ), антипротон і ін.**

Античастинки існують для всіх частинок крім **фотона**



Можливість народження і знищення частинок в процесах їх зіткнень і мимовільного розпаду є одним з головних властивостей елементарних частинок.



# Класифікація елементарних частинок

Чотири види взаємодій елементарних частинок:

**сильна, електромагнітна, слабка, гравітаційна.**

Сильні взаємодії здійснюються між частинками, які називаються адронів. Переносники взаємодії - глюони.

Адрони

```
graph LR; A[Адрони] --> B[баріони]; A --> C[мезони]
```

Баріони: протони, нейтрони і група частинок, званих гіперонами. Вони мають напівцілий спіні. На відміну від баріонів, мезони мають нульовий спіні. Все мезони нестабільні.

Частинки які не вступають в сильні взаємодії називаються **лептонами**. Кожному зарядженого лептони (електрон, мюон і тау частка) відповідає нейтральна частинка нейтрино-електронне, мюонне або тау-нейтрино. Загальна кількість лептонів одно 12.



# Кварки і стандартна модель

Адрони складаються з більш фундаментальних частинок - кварків, що мають дробовий електричний заряд, кратний  $e / 3$ , і розміри менше  $0,5 \times 10^{-19}$  м. Кварки існують тільки всередині адронів і не спостерігаються як ізольовані частки. Розрізняють 6 типів кварків.

## Стандартна модель

Вся речовина складається з 12 фундаментальних частинок – 6 лептонів і 6 кварків.

Кварки беруть участь в сильних, слабких і електромагнітних взаємодіях; заряджені лептони – в слабких і електромагнітних; нейтрино - тільки в слабких взаємодіях .

