



**Квантовая  
механика и  
квантовая химия**

***Лекция № 1***

***Русаковой Н.***

***П.***

# Учебники

- Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела "БИНОМ. Лаборатория знаний" 2012. – 496с.
- Байков Ю.А., Кузнецов В.М. Квантовая механика— М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015.— 292 с.
- Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. Учебник. В двух частях. 2016
- Ермаков А.И. . Квантовая механика и квантовая химия. – М. : Издательство Юрайт ИП Юрайт, 2016. – 555 с.



# Рейтинг курса

- Экзамен – 40 баллов (20 б. – миним. к допуску)
- Практические работы – 30 баллов
- Теоретическая часть
- (по курсу лекций – 30 баллов):
  - Работа на лекции – 0,5 балла (16 лекций – 8 баллов)
  - Тест – 11 баллов
  - Контрольная работа – 11 баллов

# Основные понятия

- **Квантовая механика** – т. раздел физики, описывающий движение и свойства микрочастиц (электронов, атомов, молекул). Совершенствует собственный набор методов исследования. Является базой для квантовой химии
- **Квантовая химия** – т. раздел химии, описывающий хим. свойства соединений, их превращения на основе методов квантовой механики



# Возникновение атомной физики

- V-IV в до н. э – Демокрит, Левкипп: понятие неделимой частицы (впоследствии «атом»)
  - 1869 г. – Д.И. Менделеев – ПСХЭ – вещество - из атомов. (А атомы? Неделимы? В то время - да!)
1. 1896 г. Антуан Анри Беккерель – открытие явления радиоактивности
  2. 1897 г. – Джозеф Джон Томсон – открытие электрона, определение массы и заряда в 1909
  3. 1899 - 1907 г. Эрнест Резерфорд, Фредерик Содди – открытие

# Радиоактивность

- **1896 г. Антуан Анри Беккерель** – для солей урана

Радиоактивность – самопроизвольное превращение неустойчивых ядер атомов одного элемента в ядра атомов других элементов.

Свойство: может проникать вглубь вещества

- **Пьер Кюри и Мария Склодовская-Кюри** – для других элементов, типы: ( $\alpha$  – излучение,  $\beta$  – излучение)

Лавуазье в 1770-х – смерть алхимии -закон о неизменности элементов



# Изотопы (U, Th, Ac)

1899 - 1907г. Эрнест Резерфорд, Фредерик Содди

- Изотопы – разновидности одного и того же хим. элемента, имеющие одинаковые хим. свойства, занимающие одно и то же

водород

углерод

1 электрон

6 электронов

6 электронов

1 протон

+ 6 протонов  
6 нейтронов

+ 6 протонов  
7 нейтронов

${}^1_1\text{H}$

${}^{12}_6\text{C}$

${}^{13}_6\text{C}$

а

б

в

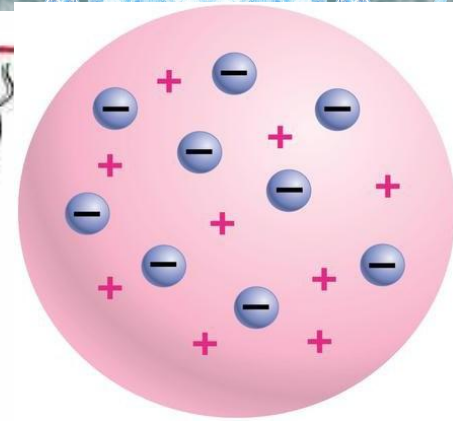
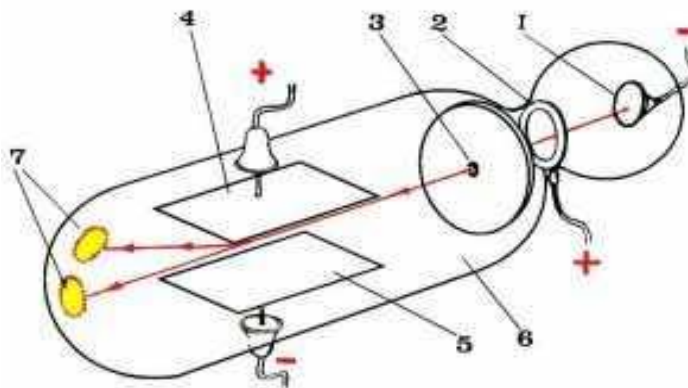
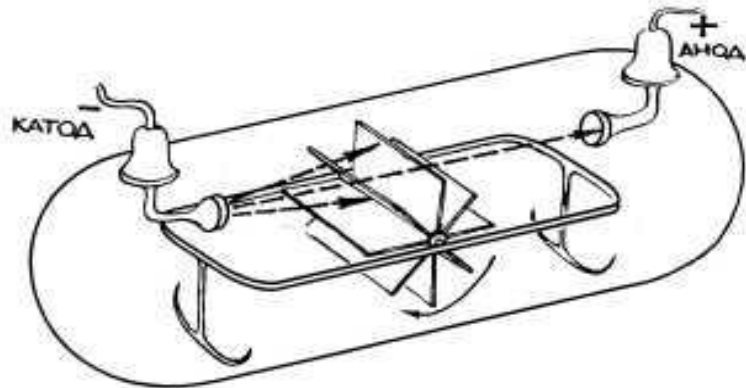
отличающиеся массой

**ЭЛЕМЕНТОМ**  
называется  
вещество,  
состоящее из  
атомов с  
одинаковым

# История появления модели

## Томсона

- 1853 – А.Массон
- 1853 – Вильям Крукс – катодные лучи (свойства: свечение некоторых веществ, кинетическая энергия, отклонение магнитным полем, отрицательный заряд)
- 1897 – Томсон модификация трубки, (хар. электрона, протона), 1903 – модель



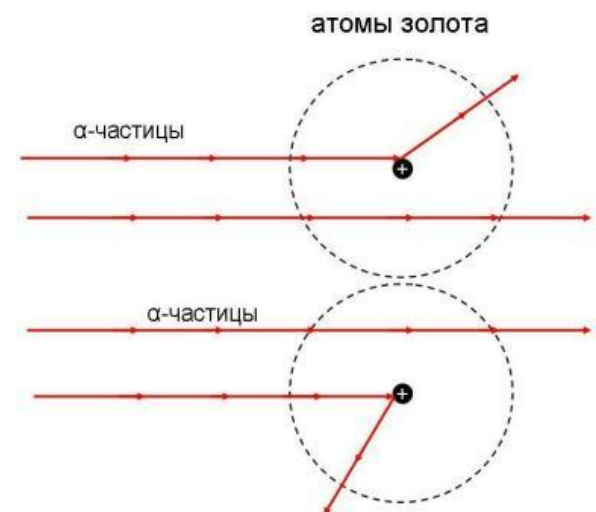
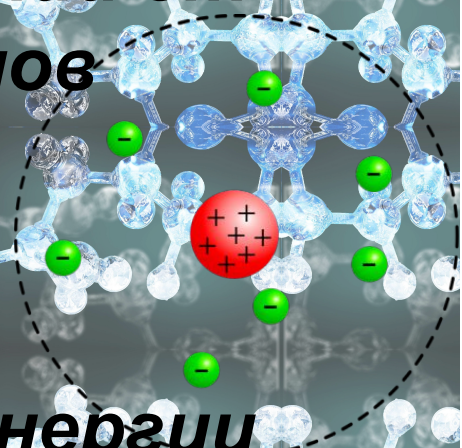


# Модель атома Резерфорда

1910 Эрнст Резерфорд, Ханс Гейгер – существование положительно заряженного ядра и на расстоянии от него роя электронов

Модель вызывала противоречия

1. Нет выделения энергии
2. Электроны не падают на ядро
3. Как атомы соединяются в молекуле?
4. Процесс испускания света нагретым телом неизвестен



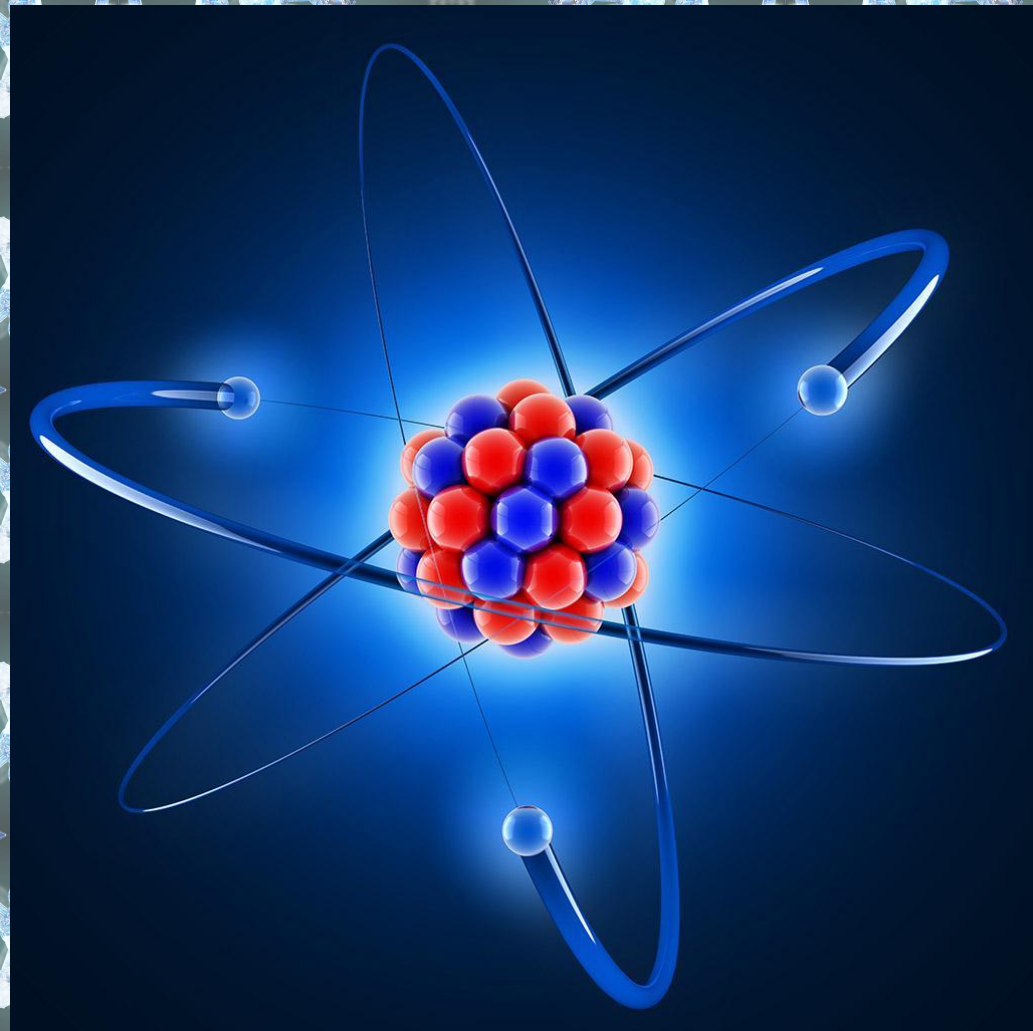


# Квантовая модель атома

## Бора

**1913 – Нильс Бор на основе двух постулатов:**

- 1. В атоме существует несколько стац. состояний. Электрон, двигаясь на этих состояниях, может существовать не излучая**
- 2. При переходе с одного стац. состояния на другое – электрон поглощает или выделяет порцию энергии - квант**



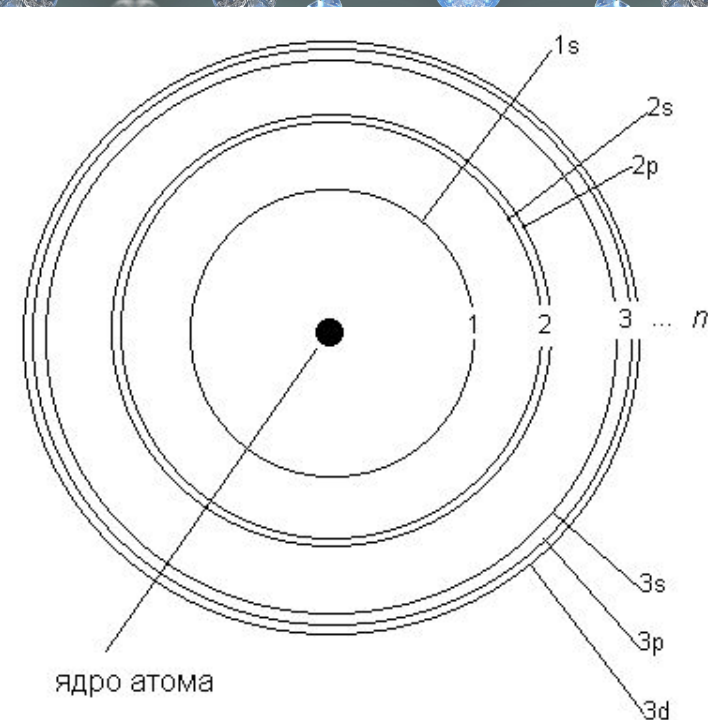


# Предпосылки квантовой теории атома

- **1910 г. Макс Планк** связал элементарный квант (порцию света) с частотой электромагнитной волны соотношением  $\varepsilon = h\nu$  (Бор:  $\Delta E = h\nu = E_1 - E_2$ )
- **1924 г. Луи де Бройль** – гипотеза о волновых свойствах материи – **в 1927 г.** – она подтверждена дифракцией электронов (**Джермер и Девиссон**)
- **С 1927 г.** гипотеза о волновых свойствах материи стала основой квантовой механики

# Квантовая модель атома Бора

- **Уровни** – электронные орбиты
- **Подуровни** составляют уровень
- **Орбитали** составляют подуровень
- Расположение электронов орбитали согласно **принципу Паули**
- Заполнение электронами уровней, подуровней и орбиталей происходит по **правилу Хунда**

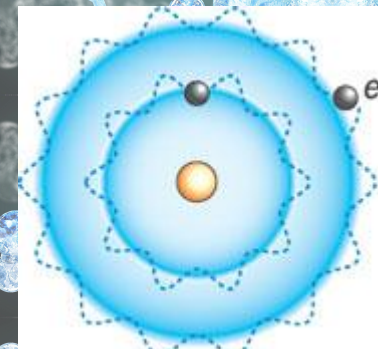
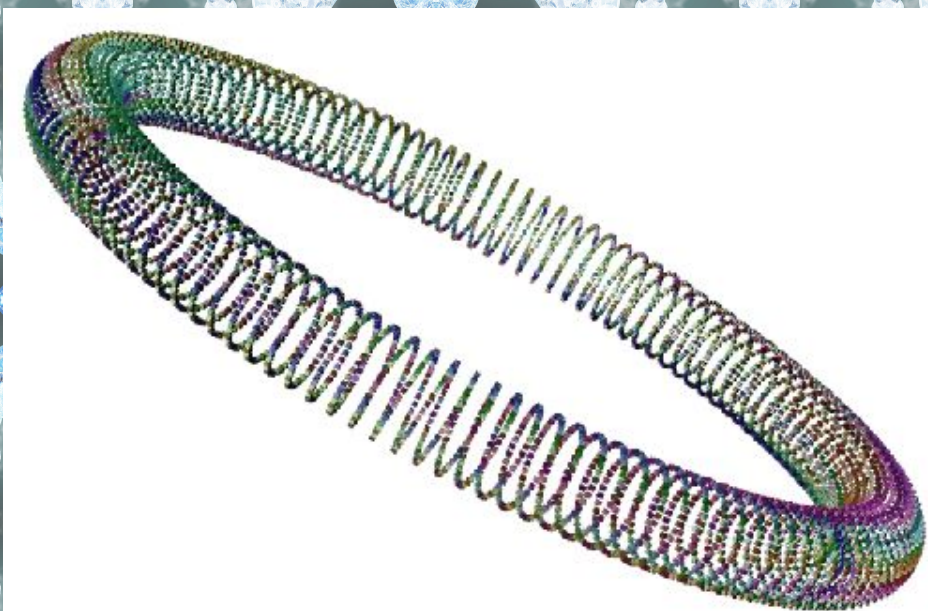
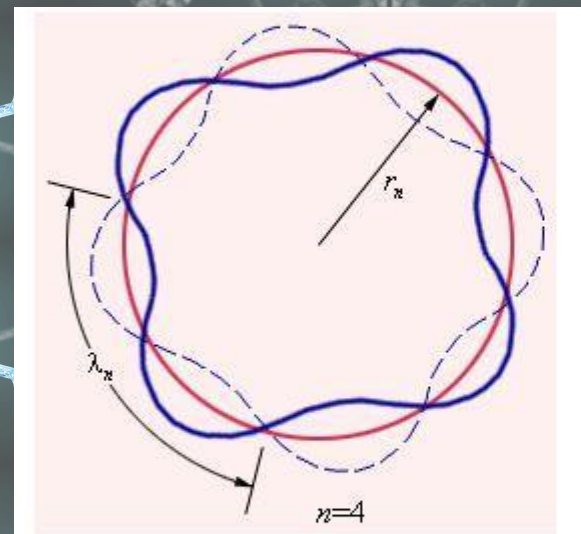
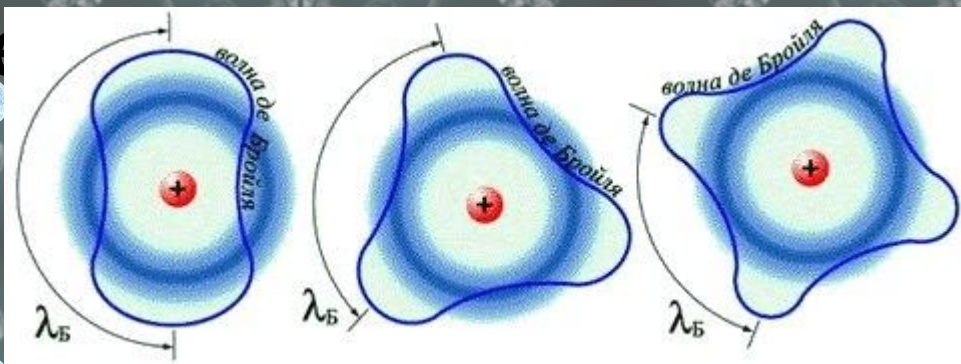




# Квантовая модель атома

## Шредингера

• Стационарная орбита – орбита, в которую укладывается целое число длин





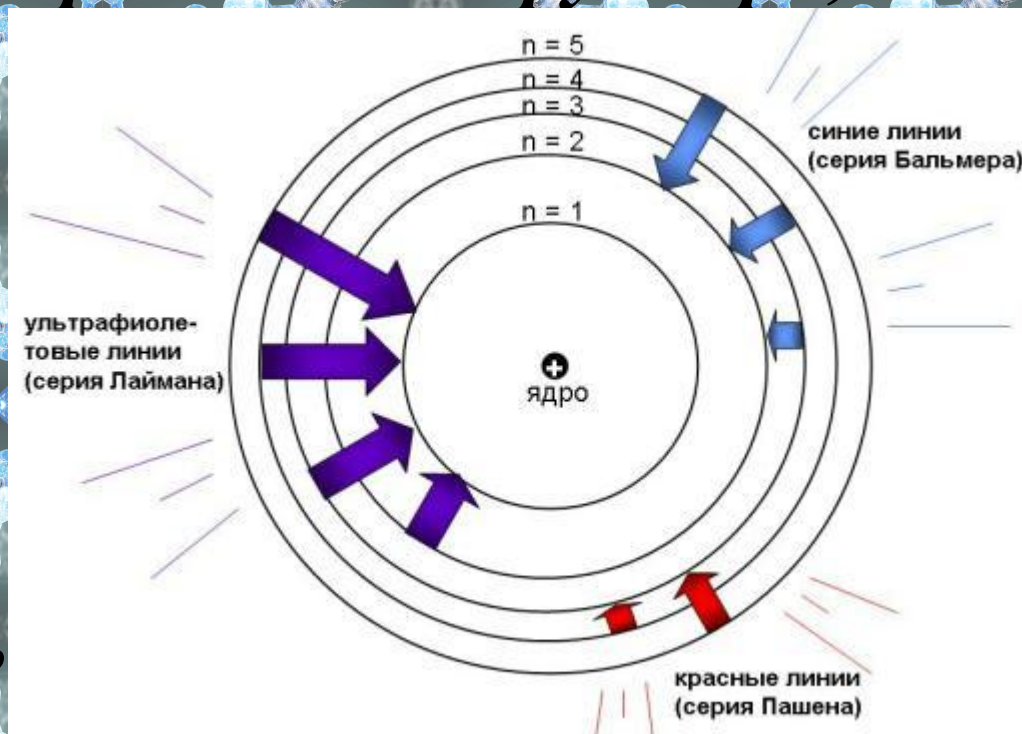
# Квантовая модель атома

## Шредингера

• Описал движение электрона-волны в прост-ранстве с помощью математического урав-нения – волновой функции –  $\psi$

• – **орбиталь** – это пространство вокруг ядра, в котором можно обнаружить заселивший её электрон **с вероят-ностью 95%**

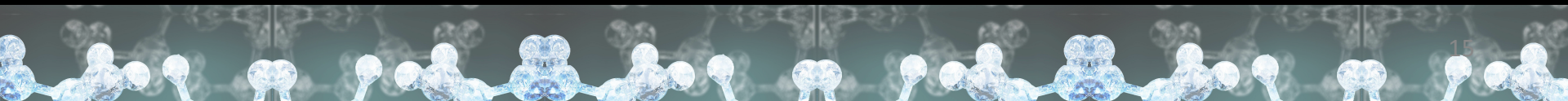
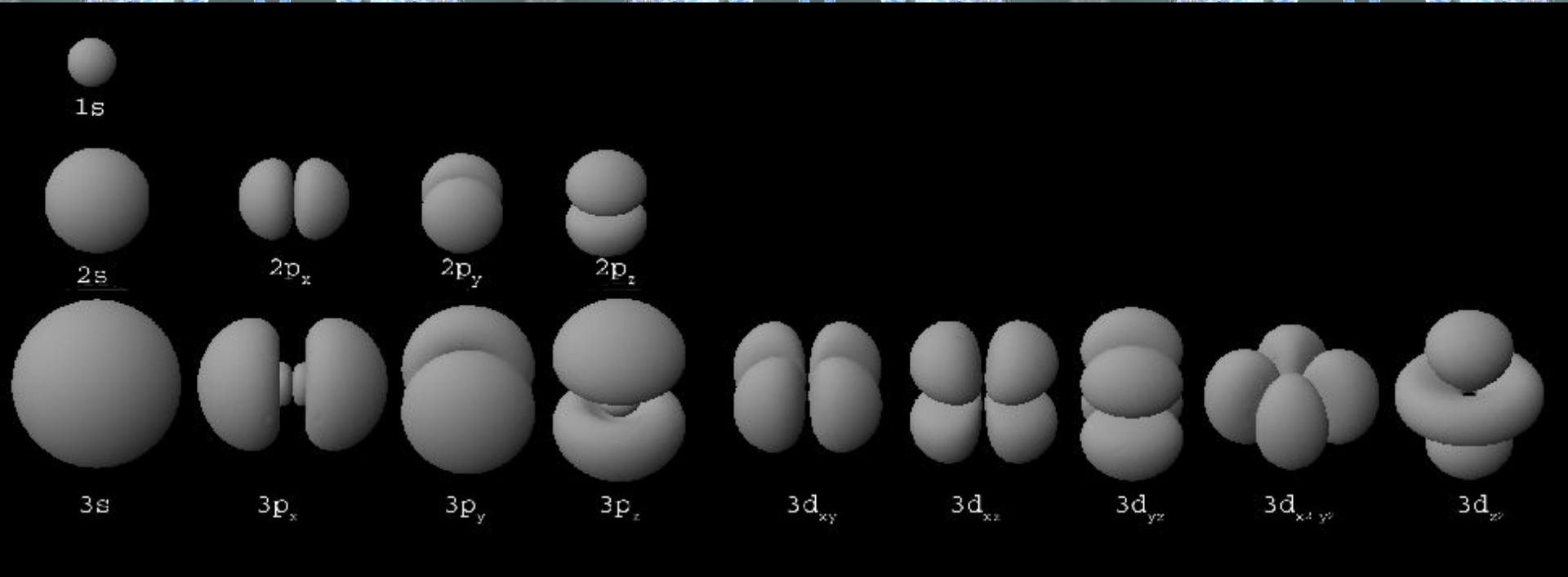
• Вероятность – из **принципа неопределён-ностей Гейзенберга** (нет точной траектории – импульс и координата одновременно с максималь-но заданной точностью)





# Квантовая модель атома Шредингера

- *Существование уровней, орбиталей различной формы*



# **Квантовая теория атома -**

- это теоретическая модель сложного природного явления – атома. Позволяет предсказывать многие (в том числе и неоткрытые) свойства различных элементов**

- Молекула – это система атомных ядер и электронов**