

Частное образовательное учреждение
высшего образования
«Восточно-Европейский институт»

Презентация

по дисциплине «Концепции современного
естествознания»

На тему: «Квантовая механика – теоретическая основа
современной химии»

Выполнила работу студентка
1 курса, группы ЗБУП-161
Перевозчикова С.А.
Работу проверила:
Самигуллина Г.З.

Введение

Особое историческое значение квантовой механики определяется тем, что она радикально преобразовала систему химического знания, подняла эту систему с уровня эмпирического и полуэмпирического знания, какой она по существу была со времен Лавуазье, на теоретический уровень. Квантовая механика привела к созданию квантовой химии и таким образом выступила в качестве теоретического базиса современной химической картины мира.

Квантовая химия

- это область современной химии, в которой принципы и понятия квантовой механики и статистической физики применяются к изучению атомов, молекул и других химических объектов и процессов.

Основные понятия и объекты химии

Атом

- наименьшая частица химического элемента, являющаяся носителем его свойств. Химический элемент, в свою очередь, можно определить как вид атомов, характеризующийся определенной совокупностью свойств и обозначаемый определенным символом.

Молекула

- наименьшая частица вещества, обладающая его основными химическими свойствами

Химическая связь

- это та связь между атомами, которая приводит к образованию молекул

Два основных типа химических связей

Ионная связь образуется за счет переноса электронов с одного атома на другой и образования при этом положительных и отрицательных ионов, которые связываются друг с другом электростатически (например, NaCl).

Ковалентная связь образуется в результате обобществления электронов (обычно электронных пар) соседними атомами; иначе говоря, электроны верхнего слоя двух (и большего количества) атомов становятся общими для этих атомов (например, в молекулах H₂, O₂, CO и др.).

Металлическая связь

Она реализуется за счет большой концентрации в кристаллах свободных электронов («электронный газ»), которые удерживают положительные ионы на определенных расстояниях друг от друга, осуществляя коллективное взаимодействие атомов

Основная задача квантовой ХИМИИ

Решение уравнение Шредингера и его релятивистского варианта (уравнение Дирака) для атомов и молекул. Уравнение Шредингера решается аналитически лишь для немногих систем (например, для моделей типа жёсткий ротатор(модель, описывающая линейные молекулы с постоянным межъядерным расстоянием. В такой модели уровни энергии зависят только от вращательного квантового числа.), гармонический осциллятор, одноэлектронная система). Реальные многоатомные системы содержат большое количество взаимодействующих электронов, а для таких систем не существует аналитического решения этих уравнений, и, по всей видимости, оно не будет найдено и в дальнейшем. По этой причине в квантовой химии приходится строить различные приближённые решения.

Приближения, используемые в квантовой химии

Приближение Борна — Оппенгеймера

движение электронов и движение ядер разделено (ядра движутся настолько медленно, что при расчёте движения электронов ядра можно принять за неподвижные объекты). В связи с этим приближением существует так называемый эффект Яна-Теллера. Данное приближение позволяет представить волновую функцию системы как произведение волновой функции ядер и волновой функции электронов.

Одноэлектронное приближение

считается, что движение электрона не зависит от движения других электронов системы. В связи с этим в уравнения, используемые в квантовой химии вносятся поправки на взаимное отталкивание электронов. Это позволяет волновую функцию электронов представить в виде суммы волновых функций отдельных электронов.

Приближение МО ЛКАО

В данном подходе волновая функция молекулы представляется как сумма атомных орбиталей с коэффициентами.

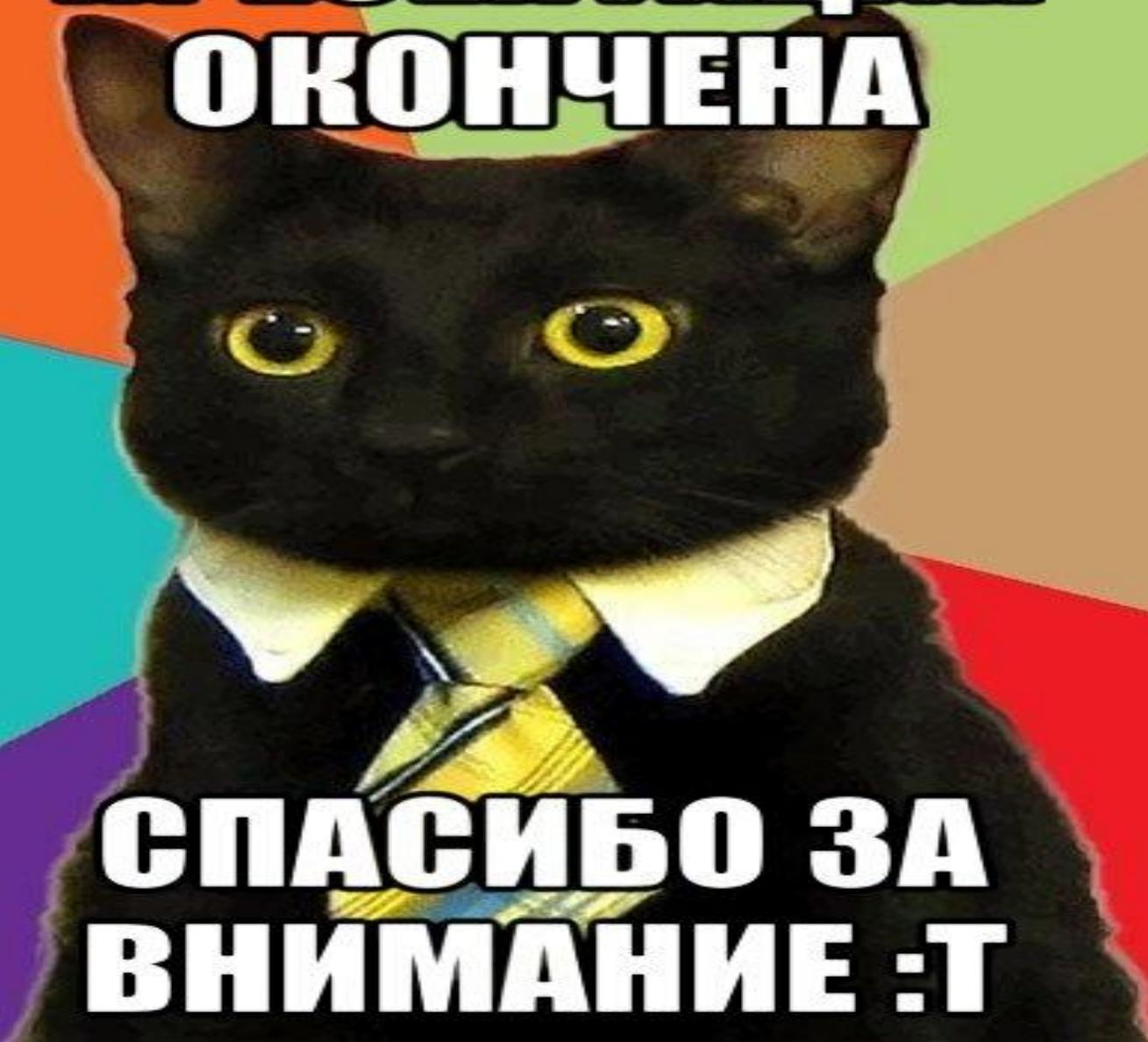
Межмолекулярное взаимодействие

- это электромагнитное взаимодействие электронов и ядер одной молекулы с электронами и ядрами другой

Заключение

В последние десятилетия квантовые подходы в химии позволили решить еще более сложные задачи, прежде всего связанные с анализом систем, изменяющихся во времени (в ходе химических реакций, распада, поглощения и испускания света и др.).

**ПРЕЗЕНТАЦИЯ
ОКОНЧЕНА**



**СПАСИБО ЗА
ВНИМАНИЕ :T**