



Новосадов Б. К.

**КВАНТОВО-
ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ
МОДЕЛИ И МЕТОДЫ
ХИМИЧЕСКОЙ
ФИЗИКИ**

Новосадов Б. К.

**«КВАНТОВО-ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ
МОДЕЛИ И МЕТОДЫ
ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ»**

Москва
2017

УДК 530.145-544.18

ББК 22.2-24.5

М 76

Новосадов Б.К.

М 76 Квантово-теоретические модели и методы химической физики: монография / Новосадов Борис Константинович / — М.: ООО «Книга по требованию», 2017 — 282 с.

ISBN: 978-5-519-50410-2

Монография посвящена изложению новых методов в квантовой теории молекул. Особое внимание уделено развитию релятивистской квантовой химии для молекулярных систем с тяжелыми атомами. Анализируется вопрос о разделении видов движения частиц в молекулах. Уравнение Шрёдингера исследуется как дифференциальное уравнение с малым параметром при производных. Впервые в литературе дана теория спиновых мультиплетов на основе анализа релятивистского многоэлектронного уравнения как в координатном, так и в импульсном представлении. Развита квантовая теория термодинамических функций и термических средних молекулярных газов, основанная на решении уравнения Блоха для статистической матрицы плотности.

УДК 530.145-544.18

ББК 22.2-24.5

ISBN: 978-5-519-50410-2

© Б.К. Новосадов, 2017

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие.....	8
Глава 1. Уравнения квантовой механики.....	13
1. Волновое уравнение для молекулярной системы.....	13
2. Импульсное представление волнового уравнения.....	18
3. Скалярное релятивистское уравнение.....	26
4. Момент количества движения свободной молекулярной системы.....	30
5. Фундаментальная зависимость кинетической энергии и кинетического момента системы частиц.....	36
6. Особенности структур систем тождественных частиц (атомов и молекул).....	42
7. О разделении видов движений в молекулярных системах.....	59
Глава 2. От квантовой системы точечных зарядов к теории химического строения.....	60
1. Особенности движения электронов и ядер в молекуле.....	60
2. Теория МО ЛКАО.....	69
Глава 3. Метод решения релятивистского волнового уравнения для атома.....	74

1. Введение.....	74
2. Релятивистское уравнение для системы электронов.....	75
3. Свойства уравнения (3.5).....	77
4. Метод решения интегрального релятивистского волнового уравнения.....	80
5. Построение линейной оболочки вырожденных собственных элементов, относящейся к сумме радикалов.....	86
6. Теория релятивистских спиновых мультиплетов.....	92
7. Базисные электронные мультиспиноры атомно-молекулярной системы.....	93
8. Сравнение с одночастичным приближением теории спиновых мультиплетов.....	95
9. Продолжение решения цепочки уравнений.....	96
10. Решение скалярного релятивистского уравнения.....	99
11. Функционал релятивистской системы.....	104
Глава 4. Физико-химические модели в теории молекул.....	108
1. Молекула как структура соединения атомов.....	108

2. Анализ молекулярной структуры как задача распознавания образов.....	110
3. Решение вспомогательного уравнения (модель Борна – Оппенгеймера). Метод атомных волновых функций.....	112
4. Решение вспомогательного уравнения методом МО ЛКАО.....	121
5. Задача о движении электрона в поле компактных ядерных распределений.....	126
Глава 5. Анализ видов движения частиц в молекулах.....	128
1. Вращения и внутренние движения частиц свободных молекул.....	128
2. О разложении кинетической энергии системы частиц по видам движения.....	131
3. Особенности движения частиц в атомной модели молекулы.....	137
4. Определение колебательных координат молекулы.....	141
5. Локальное представление движения атомов в молекулах.....	146
6. Модель смещения атомов относительно молекулярного каркаса.....	157

7. Крутильные (торсионные) движения функциональных групп и скручивающие движения белковых молекул.....	160
Глава 6. Спин-релятивистские модели химической физики.....	164
Введение.....	164
1. Теория Дирака.....	167
2. Водородоподобный атом.....	185
3. Релятивистский электрон в поле многих кулоновских центров.....	190
Глава 7. Спин-релятивистские состояния электрона в кулоновском поле нескольких точечных зарядов.....	192
Введение.....	192
1. Решение уравнения Дирака для электрона в поле нескольких зарядов.....	192
2. Вычисление матричных элементов теории ЛКАО.....	196
Глава 8. Атомная модель молекулы.....	197
1. Электронное распределение.....	197
2. Колебания ядер в атомах.....	208
3. Силы в молекулах.....	211
Глава 9. Квантовый расчет термодинамических функций газообразных веществ.....	215

1. Введение.....	215
2. Постановка задачи.....	217
3. Уравнение Блоха для статистической матрицы плотности.....	219
4. Определение и расчет характеристической функции.....	225
5. Вычисление моментов нормальных координат.....	227
6. Определение термодинамических функций молекулярного газа.....	229
7. Итерационный метод расчета моментов термических средних степеней колебательных координат.....	230
8. Второе приближение для статсуммы и плотности состояний.....	237
ПРИЛОЖЕНИЕ.....	249
1. Первая итерация уравнения Блоха.....	249
2. Интегралы второй итерации уравнения Блоха.....	258
Литература.....	270
Предметный указатель.....	274