

К.В. Боженко

ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ ХИМИИ

КОНСПЕКТ ЛЕКЦИЙ

Учебное пособие

Москва
Российский университет дружбы народов
2022

УДК 544.18(075.8)
ББК 24.511.4я73
Б76

Утверждено
РИС Ученого совета
Российского университета
дружбы народов

Рецензенты:

кандидат химических наук, доцент кафедры общей химии РУДН
М.А. Рябов;

кандидат химических наук, старший научный сотрудник ИПХФ РАН
А.Н. Утеньшев

Боженко, К. В.

Б76 Основы квантовой химии : конспект лекций : учебное пособие / К. В. Боженко. – Москва : РУДН, 2022. – 113 с. : ил.

ISBN 978-5-209-11080-4

Конспект лекций предназначен для студентов III курса факультета физико-математических и естественных наук, обучающихся по специальности «Химия». Включает основы классической и квантовой механики, а также квантовой химии. Пособие соответствует программе курса «Основы квантовой химии» и адресовано студентам, изучавшим ранее курс высшей математики и общей физики в объеме университетской программы для студентов-химиков.

Издание подготовлено на кафедре физической и коллоидной химии РУДН.

УДК 544.18(075.8)
ББК 24.511.4я73

ISBN 978-5-209-11080-4

© Боженко К.В., 2022
© Оформление. Российский университет
дружбы народов, 2022

ОГЛАВЛЕНИЕ

От автора	3
Введение	4
Глава I. Классическая механика	7
Уравнения Ньютона и уравнения Лагранжа	7
Канонические уравнения Гамильтона	11
Законы сохранения	12
Гармонический осциллятор	21
Глава II. Квантовая механика	25
Принцип неопределенности Гейзенберга	29
Волновая функция системы	30
Принцип суперпозиции	31
Операторы	32
Уравнение Шредингера	39
Стационарные состояния	41
Момент импульса микрочастицы	42
Спин электрона	46
Сложение моментов. Схема Рассела–Саундерс	48
Квантовый осциллятор	50
Туннельный эффект	54
Свободная частица	61
Частица в одномерном потенциальном ящике	62
Жесткий ротатор	65
Уравнение Шредингера для атома водорода	67
Принцип Паули	74
Глава III. Квантовая химия	76
Приближение Борна–Оппенгеймера	76
Вариационный метод и вариационный принцип	80
Одноэлектронное приближение, уравнения Хартри	84
Волновая функция системы в одноэлектронном приближении	90
Средняя энергия многоэлектронной системы в одноэлектронном приближении	92
Уравнения Хартри–Фока	94
Уравнения Хартри–Фока для замкнутых оболочек	99
Линейный вариационный метод, уравнения Рутаана	104
Вопросы для самопроверки и обсуждения по темам	110
Литература	112