



КВАНТОВА ХІМІЯ — міждисциплінарний розділ знань про природу, знаходиться на стику хімії, фізики, математики та кібернетики. К. х. використовує ідеї та методи **квантової механіки** при розрахунках поведінки електронів і атом. ядер у хім. реакціях, а також для пояснення властивостей молекуляр. систем. Така потенц. можливість стала зрозумілою ще на поч. 20 ст., однак на практиці подібні розрахунки довго залишалися неможливими внаслідок складності рівнянь квант. механіки для систем, які складаються з великої кількості електронів та ядер (атоми, молекули, нанокластери, кристалічні та аморфні тверді тіла). Найрозповсюдженіший варіант теор. розрахунку властивостей багаточастинк. систем базується на розв'язанні стаціонар. рівняння Шредінгера $H\psi = E\psi$, де H — оператор Гамільтона, E та ψ — повна енергія та хвильова функція відповідно. Рівняння Шредінгера — диференц. лінійне рівняння другого порядку в частин. похідних. Хвильова функція у залежить від просторових та спінових координат усіх мікрочастинок системи, за допомогою якої фактично можна розрахувати макроскопічні системи. Спін мікрочастинок враховується спец. завданням хвильової функції у вигляді т. зв. детермінанта Слетера. Основоположником К. х. в Україні вважають **Ю. Кругляка**, який після наук. стажування у США (1963) вперше в країні створив лаб. квант. хімії в Інституті фіз. хімії АН УРСР (згодом була реорганізована у відділ квант. механіки молекул Інституту теор. фізики АН УРСР) у Києві. Особливо бурхливий розвиток К. х. отримала у результаті досліджень австр. фізика В. Кона, який запропонував та розробив теорію функціонала густини, що дозволило значно спростити схему розрахунків і врахувати кореляц. поправки до енергії, та англ. математика і фізика Дж. Попла, наук. колектив під керівництвом якого створив і продовжує постійно удосконалювати комп'ютерні програми, здатні розглядати молекулярні системи великих розмірів (лауреати Нобелів. премії з хімії 1988). Нині роботи з розвитку методів К. х. та її застосування у наук. дослідженнях проводять у багатьох установах НАНУ та ВНЗ України. Так, в Інституті хімії поверхні НАНУ (Київ) діє відділ квант. хімії та фізико-хімії наносистем, у якому досліджено широке коло адсорбцій. явищ та хім. перетворень на поверхні твердого тіла, що знайшли свою інтерпретацію на під-

ґрунті квантово-хім. розрахунків (кер. **В. Лобанов**). У Інституті фіз. хімії НАНУ під керівництвом **П. Стрижака** проводяться квантово-хім. дослідження, спрямов. на з'ясування каталіт. властивостей нанокластерів металів, їхніх оксидів і вуглец. наноструктур, зокрема вуглец. нанотрубок та графену, в окисно-відновних та кислотно-основних процесах. **Б. Мінаєв** у Черкас. університеті застосовує методи К. х. до розгляду багатьох аспектів фото- та біохім. активації молекуляр. кисню. На каф. хімії Донец. університету економіки і торгівлі під керівництвом **О. Дмитрука** проводяться квантово-хім. дослідження реакцій. здатності орган. сполук і механізмів їхніх перетворень у радикал. процесах окиснення. Тематика наук. досліджень **Д. Баб'юка** у Чернів. університеті зосереджена на квант. описі адіабатич. динаміки біомолекуляр. хім. реакцій у рамках нестаціонар. підходу та на бомівському формулюванні квант. траєкторій у дослідженнях динаміки реакцій. У Харків. університеті на каф. хім. матеріалознавства **В. Іванов** вивчає теорію зв'язаних кластерів та нелінійно-оптич. властивостей спряжених систем. Теорію матриці густини та ефекти дисперсій. взаємодій розвиває **А. Лузанов** в Інституті монокристалів НАНУ (Харків). У перспективі розвиток К. х. спрямов. на вивчення динаміки трансформації молекуляр. систем та детальніший аналіз поверхонь потенц. енергії у застосуванні до динаміч. задач.

Рекомендована література

1. Гельман Г. Г. Квантовая химия. Москва, 1937;
2. Козман У. Введение в квантовую химию / Пер. с англ. Москва, 1960;
3. Нагакури С., Накадзима Т. Введение в квантовую химию / Пер. с япон. Москва, 1982;
4. Ковальчук Є. П. Основи квантової хімії: Навч.-метод. посіб. К., 1996;
5. Грибов Л. А., Муштакова С. П. Квантовая химия. Москва, 1999;
6. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия. Москва, 2001;
7. Стрижак П. Є. Квантова хімія: Підруч. К., 2009.

В. В. Лобанов

Бібліографічний опис:

Квантова хімія / В. В. Лобанов // Енциклопедія Сучасної України [Електронний ресурс] / Редкол.: І. М. Дзюба, А. І. Жуковський, М. Г. Железняк [та ін.] ; НАН України, НТШ. — К. : Інститут енциклопедичних досліджень НАН України, 2012. — Режим доступу: <https://esu.com.ua/article-11534>

2001-2025 © Ця енциклопедична стаття захищена авторським правом згідно з чинним законодавством України ([докладніше](#)).