## НЕКОТОРЫЕ АСПЕКТЫ СОВРЕМЕННОЙ КВАНТОВОЙ ХИМИИ

Полещук О. X. Томский государственный педагогический университет Томск, Россия

В настоящее время под квантовой химией понимается сформировавшаяся на стыке теоретической физики, прикладной вычислительной математики и химии область знаний, в которой создана последовательная количественная теория строения и основных свойств многоатомных молекул и реакций между ними. Современная квантовая химия дала возможность понять, как устроен микромир на молекулярном уровне и позволила с достаточно высокой степенью достоверности производить численный прогноз. На основании такого прогноза можно судить, во-первых, о самой возможности существования той или иной молекулярной системы как устойчивой совокупности атомов, во-вторых, индивидуальных характеристиках таких систем (геометрическое строение, распределение заряда внутри молекулы и др.), в-третьих, преимущественных направлениях тех или иных химических реакций. Создание мощного программного обеспечения, наряду с самим развитием ЭВМ, сделало такой прогноз практически доступным широкому кругу исследователей разных направлений. Стало реальным говорить о так называемом инженерном уровне расчетов, когда достоверность прогноза достигает 80-90%, причем прогноз делается за столь короткий промежуток времени, что можно испытать множество вариантов быстрее, чем провести натурный эксперимент.

Современный исследователь-химик уже не может ограничиться лишь традиционными химическими знаниями, навыками и экспериментами. Параллельно с этим и даже с некоторым опережением должны проводиться квантово-химические расчеты. Сейчас уже, поэтому можно смело говорить о двух равноправных сторонах одного и того же исследовательского процесса. Компьютер реально становится таким же инструментом исследования, как и привычный химический или физико-химический эксперимент. Расчет и эксперимент может, следовательно, проводить один и тот же человек.

Квантово-химический расчет и анализ электронного строения являются единственными методами выяснения происхождения физических и химических свойств на электронном уровне. Так как все существующие в настоящее время теории включают в себя элементы эмпирического характера, успех применения таких теорий в очень большой степени зависит от выбора расчетной модели. Именно поэтому выяснение применимости той или иной расчетной схемы является важной проблемой.

В настоящее время с помощью анализа разделения энергии, можно оценить ковалентную и электростатическую составляющие донорно-акцепторной связи, т.е. понять её природу. Результаты анализа разделения энергии разнообразных донорно-акцепторных комплексов переходных металлов и элементов главных подгрупп демонстрируют, что можно исследовать природу химической связи не только качественно, но и количественно. Спекулятивные обсуждения о том, является ли химическая связь более ковалентной или более электростатической по природе, которые часто ведут к спорам, не могли быть разрешены из-за неясных определений и сомнительных корреляций с экспериментальными данными. Но теперь можно обратиться к точным ответам. Представленная интерпретация природы химической связи весьма хорошо согласуется с «химической интуицией» и предыдущими предположениями, которые базировались на качественных аргументах. Таким образом, результаты анализа разделения энергии не приводят к полностью противоречивой картине химической связи по сравнению с предыдущими предложениями.

В докладе на основании исследований автора представлены некоторые результаты проведенных современных квантовохимических расчетов координационных соединений, включая комплексы платины, используемые в лечении онкологических заболеваний