

**К.В. Боженко**

---

# **ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ ХИМИИ**

---

**Конспект лекций**

**Москва  
Российский университет дружбы народов  
2010**

ББК 24.511.2  
Б 76

У т в е р ж д е н о  
*РИС Ученого совета  
Российского университета  
дружбы народов*

Р е ц е н з е н т –  
доктор химических наук, профессор *Е.А. Поленов*

**Боженко, К.В.**  
Б 76 Основы квантовой химии [Текст] : конспект лекций /  
К.В. Боженко. – М. : РУДН, 2010. – 124 с.

ISBN 978-5-209-03510-7

Конспект лекций 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.

Для студентов 3-го курса факультета физико-математических и естественных наук, обучающихся по специальности «Химия».

Подготовлено на кафедре физической и коллоидной химии РУДН.

ISBN 978-5-209-03510-7

ББК 24.511.2

© Боженко К.В., 2010

© Российский университет дружбы народов, Издательство, 2010

## СОДЕРЖАНИЕ

От автора .....	3
Введение .....	4
<b>I. Классическая механика</b> .....	7
Уравнения Ньютона и уравнения Лагранжа .....	7
Однородные функции .....	10
Теорема Эйлера .....	11
Канонические уравнения Гамильтона .....	11
Законы сохранения .....	12
Энергия .....	14
Импульс .....	16
Центр инерции .....	17
Момент импульса .....	19
Гармонический осциллятор .....	22
<b>II. Квантовая механика</b> .....	25
Принцип неопределенности Гейзенберга .....	29
Волновая функция системы .....	30
Принцип суперпозиции .....	32
Операторы .....	32
Линейность операторов .....	35
Эрмитовость операторов .....	35
Уравнение Шредингера .....	40
Стационарные состояния .....	42
Момент импульса микрочастицы .....	43
Спин электрона .....	47
Сложение моментов. Схема Рассел-Саундерс .....	50
Квантовый осциллятор .....	52
Туннельный эффект .....	56
Свободная частица .....	64
Частица в одномерном потенциальном ящике .....	65
Жесткий ротатор .....	69
Уравнение Шредингера для атома водорода .....	71
Принцип Паули .....	78

<b>III. Квантовая химия</b> .....	80
Приближение Борна-Оппенгеймера .....	80
Вариационный метод и вариационный принцип.....	85
<i>Вариационный принцип</i> .....	85
<i>Вариационный метод</i> .....	87
Одноэлектронное приближение, уравнения Хартри .....	88
Волновая функция в одноэлектронном приближении .....	95
Средняя энергия в одноэлектронном приближении.....	97
Уравнения Хартри-Фока .....	100
Уравнения Хартри-Фока для замкнутых оболочек .....	105
Линейный вариационный метод, уравнения Рутаана.....	110
 <b>Описание и программа курса</b> .....	 116