

A kémia modelljein innen és túl

Within and beyond the models of chemistry

CSÁSZÁR Attila Géza

ELTE Eötvös Loránd Tudományegyetem,
Kémiai Intézet, Molekulaszerkezet és Dinamika Laboratórium
és

MTA-ELTE Komplex Kémiai Rendszerek Kutatócsoport
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A

email: attila.csaszar@ttk.elte.hu, honlap: <http://csaszar.chem.elte.hu>

ABSTRACT

It is impossible to understand the development of chemistry and its notions without studying those models which have been used by chemists to understand the behavior of the ever more complex systems they study experimentally. Much of modern chemistry is based on classical mechanical notions and the models based on them explain successfully a large number of chemical phenomena. Nevertheless, those cases are particularly interesting which require a quantum-mechanical treatment. For example, the notion of a 3D “molecular structure” is based on classical mechanics and it is one of the pillars of our understanding of the material world around us. Electronic-structure computations indeed yield a static, equilibrium structure, which, in the case of semirigid molecules, represents well their effective shape. However, there exist quasistructural molecules for which neither the equilibrium structure nor the separation of vibrational and rotational motion is adequate. It should also be mentioned that similar to the delocalization of light electrons, in certain systems the heavy nuclei can also be delocalized in a large portion of 3D space. The notion of potential energy surfaces, reaction paths, and reaction barriers are important to understand chemical reactions. However, there is not only kinetic and thermodynamic control of reactions but there is also tunneling control. As a final example, while we learned to think in terms of bound states, there are long-lived quasibound (resonance) states beyond the dissociation limit. Their study requires non-Hermitian quantum chemistry.

Keywords: models, structure and shape, quasistructural molecules, tunneling, quasibound states

KIVONAT

A kémia fejlődését – és részben mai fogalomrendszerét – lehetetlen megérteni anélkül, hogy ne tanulmányoznánk azokat a modelleket, melyeket a különböző korokban a kémikusok a változó bonyolultságú, de idővel egyre komplexebb kísérleteik eredményeinek magyarázatára alkalmaztak. A modern kémia jelentős része klasszikus mechanikai fogalmakon alapul, a vegyészek sikeresen alkalmazzák ezeket a fogalmakat a kvantumkémiaiban is. Különösen érdekesek azok az esetek, amik kikényszerítik a jelenségek kvantumkémiai értelmezését. Vegyük például a klasszikus mechanikán alapuló 3D „molekulaszerkezet” fogalmát, mely központi jelentőséggel bír a bennünket körülvevő anyagi világ megértésében. Az elektronszerkezet-számítások valóban egy statikus, ún. egyensúlyi szerkezetet szolgáltatnak, mely félmerev molekulák esetében jól reprezentálja az effektív alakot. De léteznek kváziszerkezetű molekulák is, melyekre sem az egyensúlyi szerkezet, sem a forgó és rezgő mozgás szétválasztása nem elfogadható. További érdekesség, hogy a könnyű elektronok delokalizációjához hasonlóan sor kerülhet a nehéz magok jelentős térbeli delokalizációjára is. Hasonlóan fontos a vegyészek számára a potenciális energia felület, a reakcióutak és az energiagátak fogalma, amit a kémiai rendszerekben végbemenő reakciók értelmezésekor alkalmaznak. Ugyanakkor nem csak kinetikai és termodinamikai kontrollja van a reakcióknak, hanem alagúthatás kontrollja is lehet. Az utolsó példa, hogy bár megtanultuk, hogy kvantum rendszerekről a kötött állapotok segítségével gondolkozzunk, léteznek nemkötő (rezonancia) állapotok is a disszociációs határon túl. Vizsgálatukhoz ki kellett fejleszteni a nem-hermitikus kvantummechanikát.

Kulcsszavak: modell, szerkezet és alak, kváziszerkezetű molekulák, alagúthatás, kvázikötött állapotok