



საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემია

ქართული ენციკლოპედიის ი. აბაშიძის სახელობის მთავარი სამეცნიერო რედაქცია

კვანტური ქიმია

კვანტური ქიმია, თეორიული ქიმიის დარგი, რომელიც ქიმიური სისტემების (ატომების, მოლეკულების, ქიმიური რეაქციების) შესწავლისას ეყრდნობა კვანტური მექანიკის კონცეფციებსა და მეთოდებს. კ. ქ-ის ფარგლებში შესაძლებელი გახდა ისეთი ფუნდამენტური პრობლემების გამოკვლევა, როგორცაა პერიოდულობის კანონის არსი, ვალენტობა, ქიმიური ბმის ბუნება, მოლეკულის სტრუქტურა, თვისებები და სხვ. ამგვარად, კ. ქ. ფიზიკისა და ქიმიის მომიჯნავე დარგია.

კ. ქ-ის საფუძველს წარმოადგენს ე. შროდინგერის სტაციონარული (დროზე დამოუკიდებელი) განტოლება $\hat{H}\Psi = E\Psi$, სადაც \hat{H} არის სისტემის ჰამილტონიანი, E – სისტემის სრული ენერგია, ხოლო Ψ – სისტემის ტალღური ფუნქცია, რ-იც აღწერს სისტემის კვანტურ მდგომარეობას (ფიზიკურ სიდიდეთა გამომკვების შედეგებს). შროდინგერის განტოლების ზუსტი ანალიზური ამოხსნა ცნობილია მხოლოდ ერთელექტრონიანი ნაწილაკებისათვის (წყალბადის ატომი, წყალბადისნაირი, ანუ ერთელექტრონიანი იონები, წყალბადის მოლეკულური იონი H_2^+). რაც შეეხება მრავალელექტრონიან სისტემებს, შესაბამისი განტოლების ამოხსნა შესაძლებელია მხოლოდ მიახლოებითი მეთოდებით.

კოვალენტური ბმის ფიზიკური არსი ნათელი გახდა H_2 უმარტივესი მოლეკულის კვანტურ-მექანიკური გამოთვლით (1927, ვ. ჰაიტლერი, ფ. ლონდონი). ამ პერიოდიდან თანდათანობით აღმოცენდა და განვითარდა კ. ქ-ის ძირითადი მიახლოებითი მეთოდები: ვალენტური ბმების – ვბ (ვ. ჰაიტლერი, ფ. ლონდონი, ლ. პოლინგი, ჯ. სლეტერი), მოლეკულური ორბიტალების – მო (რ. ჰუნდი, ჯ. ლენარდ-ჯოუნსი, რ. მალიკენი, ვ. ჰიუკელი), კრისტალური ველის – კვ (პ. ბეტე, ჯ. ვანფლექი).

ვბ მეთოდი ეყრდნობა ჯ. ლუისის უაღრესად შორსმჭვრეტელურ კონცეფციას, რ-ის მიხედვითაც საზიარო ელექტრონული წყვილის (ან წყვილების) მეშვეობით წარმოიქმნება - ორცენტრიანი ქიმიური ბმები. ამ თვალსაზრისით ვბ მეთოდი წარმოადგენს აღნაგობის კლასიკური წარმოდგენების კვანტურ-მექანიკურ ეკვივალენტს. ვბ თეორიის ფარგლებში შესაძლებელი გახდა მოლეკულათა რიგი ფიზ.-ქიმ. მახასიათებლის, განსაკუთრებით - - ტოპოლოგიის (გეომეტრიული აღნაგობის) ახსნა. ვბ თეორიის გამოყენება განსაკუთრებით წარმატებული აღმოჩნდა კოორდინაციული ნაერთების აღნაგობისა და თვისებების გამოკვლევისას.

კრისტალური ველის (კვ) თეორიის წარმოდგენები კ. ქ-ში გადმოტანილია მყარი სხეულის ფიზიკიდან. ეს მიდგომა ეყრდნობა დაშვებას, რომ სფერულისაგან განსხვავებული სიმეტრიის კრისტალურ ველში გადაგვარებული (ერთნაირი ენერჯის მქონე) ორბიტალები სხვადასხვანაირად ჯგუფდებიან. ამ მიდგომის მათემატიკურ საფუძველს ჯგუფთა თეორია წარმოადგენს. დღეისთვის დომინანტურია მო მეთოდი, რ-შიც ძირითადია დაშვება, რომ მოლეკულური ორბიტალები მრავალცენტრიანია - მოიცავს მთელ მოლეკულას. მო მეთოდის ფარგლებში გადაიჭრა და აიხსნა არაერთი მნიშვნელოვანი პრობლემა (ჟანგბადის პარამაგნიტულობა, ელექტრონდეფიციტური სისტემების აღნაგობა, გარდამავალი კომპლექსის სტრუქტურა და სხვ.). მო მეთოდი აერთიანებს როგორც ურთულეს არაემპირიულ (ab initio) გამოთვლებს, ისე შედარებით იოლ ნახევრადემპირიულ და ემპირიულ მეთოდებს (მ. შ. უმარტივესია ჰიუკელის მიდგომა - ე. წ. π ელექტრონული მიახლოება).

კომპიუტერული გამოთვლითი მეთოდების განვითარებამ ხელმისაწვდომი გახადა ურთულესი სისტემების კვანტურ-ქიმიური შესწავლა და ინტერპრეტაცია.

ს ა ქ ა რ თ ვ ე ლ ო შ ი კ. ქ-ის ჩარჩოებში პირველი გათვლები უმარტივესი სამატომიანი მოლეკულებისთვის განახორციელა გ. გორდაძემ (1935). XX ს. II ნახევარში აქცენტი ქიმიური სტატიკიდან (იზოლირებული მოლეკულა) ქიმიურ დინამიკაზე (ქიმიური რეაქციები) იქნა გადატანილი. მეთოდოლოგიური და გამოთვლითი სირთულეების მიუხედავად, მიღებულია ძალზე საინტერესო ფუნდამენტური შედეგები. ამ მიმართულების ერთ-ერთი უახლესი განხრის - პოლარულ გამხსნელებში მიმდინარე რეაქციების კვანტური კინეტიკის - ფუძემდებელია რ. დოლონაძე, რ-ის ძირითადი შრომები ეძღვნება ქიმიურ, ელექტროქიმიურ და ბიოქიმიურ პროცესებში მუხტის გადატანისა და ფოტოგადატანის კვანტურ თეორიებს.

გ. ციციშვილმა შეიმუშავა მოლეკულებს შორის განზიდვაზე პოლარობის გავლენის გაანგარიშების კვანტურ-ქიმ. მეთოდი, იკვლევდა მოლეკულათშორის ნ ყ ა ლ ბ ა დ უ რ ი ბ მ ე ბ ი ს თავისებურებებს, ვალენტური რხევების სიხშირის შემცირების მიზეზებს, ჰალოგენწყალბადების ასოციაციის მექანიზმს.

მ. გვერდნითელის მნიშვნელოვანი სამეცნიერო გამოკვლევები (1985–95) ეძღვნება ორგანულ ნაერთთა ზოგიერთი კლასის და მათი გარდაქმნების კვანტურ-მექანიკურ და მათ.-ქიმ. შესწავლას.

ჰიუკელის მიდგომის გათვალისწინებით მნიშვნელოვანი შედეგები აქვს მიღებული გ. ალმანოვს. მრავალატომიანი სისტემების მდგრადობას იკვლევდა ნ. ვაშაყმაძე-ვასილიევა. მანვე რ. და ა. გახოკიძეებთან ერთად 2005–08 გამოიკვლია სინათლის შთანთქმის შედეგად ბიომოლეკულებში მექანიკური ძალების და მაბრუნებელი მომენტის წარმოქმნის შესაძლო მექანიზმი. მომავალში ასეთი მოვლენა შესაძლოა გამოიყენონ მზის ენერჯის უშუალოდ მექანიკურ ენერჯიად გარდასაქმნელად.

XXI ს. დასაწყისში უკვე შეიქმნა „მოლეკულური მანქანები“, ანუ ისეთი მოლეკულები, რ-თა ნაწილები გარეშე ზემოქმედების, კერძოდ, ულტრაიისფერი დასხივების გავლენით შეიძლება ავამოძრავოთ ერთმანეთის მიმართ სასურველი მიმართულებით (ჟ.-პ. სოვაჟი, ფ. სტოდარტი, ბ. ფერინგა, ნობელის პრემია ქიმიაში, 2016). XXI ს. დასაწყისში საქართველოში საფუძველი ჩაეყარა მოლეკულების ელექტრონული აღნაგობის და რეაქციისუნარიანობის რაოდენობრივი აღწერის კვლევებს კ. ქ-ის თანამედროვე მეთოდის – სიმკვრივის ფუნქციონალის თეორიის (Density functional Theory) – გამოყენებით (ჟ. კერესელიძე).

საქართველოში აღზრდილი მრავალი მეცნიერი, წარმატებით მონაწილეობს ქიმ. და - ბიოქიმიური მოლეკულური სისტემების ელექტრონული აღნაგობის და რეაქციისუნარიანობის კვლევებში.

ლიტ.: გ ვ ე რ დ ნ ი თ ე ლ ი მ., კ ე რ ე ს ე ლ ი ძ ე ჯ., ტ უ ლ უ შ ი დ., ქიმიური ბმები, თბ., 1999; Д о г о н а д з ე Р. Р., К у з н е ц о в А. М., Кинетика химических реакций в полярных растворителях, კრ.: Итоги науки и техники. Физическая химия. Кинетика, т. 2, М., 1973; K e r e s e l i d z e J., K v a r a i a M., M i k u s h a d z e G., Quantum-Chemical Modeling of the Stacking mechanism for the 1H-4H Proton Transfer in Piridin Derivatives. A DFT Study, «Journal of Physical and Theoretical Chemistry», 2015, 12; K e r e s e l i d z e J., M i k u s h a d z e G., B o b o k h i d z e L., Quantum-Chemical Study of the Propensity of the Amino Acid Pairs for the Peptide Bond Formation, «Journal of Computer Science & Systems Biology», 2017, v. 10(1), 014-016; K u z n e t s o v A. M., S c h u l t z e J. W., U l s t r u l P. W., Revaz R. Dogonadze (1931–85), «Journal of Electroanalytical Chemistry», 1986, v. 204.

მ. გვერდნითელი