

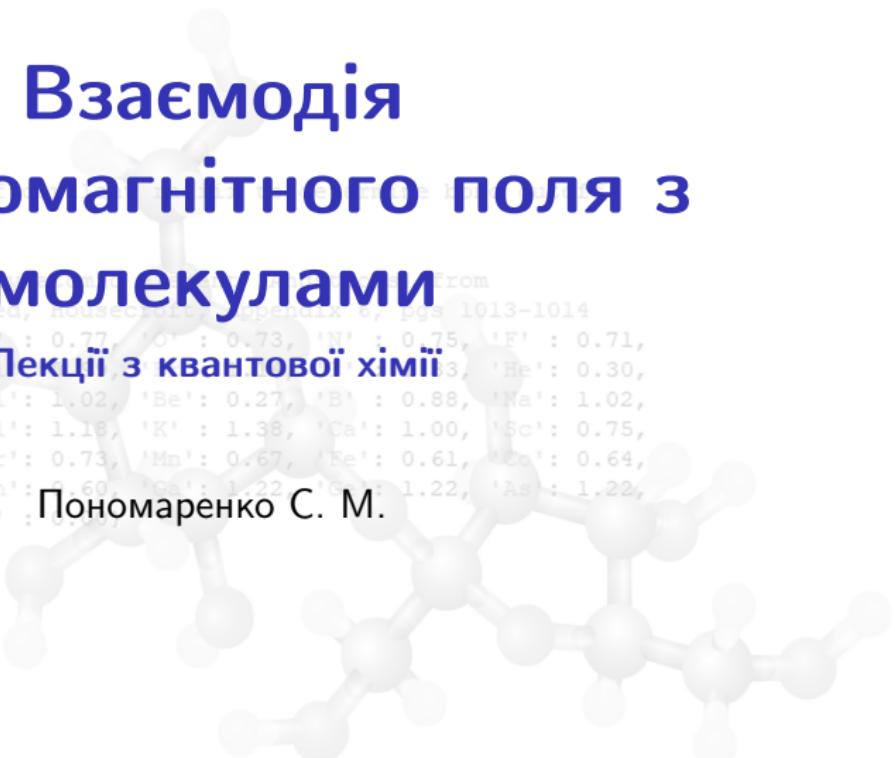
```
import sys, math
## CONSTANTS ##
# threshold = 1.2
bond_thresh = 1.2

# covalent (or ionic) radii
# "Inorganic Chemistry" 3rd ed., Housecroft, Appendix 6, pgs 1013-1014
cov_rads = { 'H' : 0.37, 'C' : 0.77, 'O' : 0.73, 'N' : 0.75, 'F' : 0.71,
    'P' : 1.10, 'S' : 1.03, 'Ne' : 0.84, 'Ar' : 1.00, 'Li' : 1.02, 'Be' : 0.27, 'B' : 0.88, 'Na' : 1.02,
    'Mg' : 0.72, 'Al' : 1.30, 'Si' : 1.18, 'K' : 1.38, 'Ca' : 1.00, 'Sc' : 0.75,
    'Ti' : 0.86, 'V' : 0.79, 'Cr' : 0.73, 'Mn' : 0.67, 'Fe' : 0.61, 'Co' : 0.64,
    'Ni' : 0.55, 'Cu' : 0.46, 'Zn' : 0.60, 'Ga' : 1.22, 'Ge' : 1.22, 'As' : 1.22,
    'Se' : 1.17, 'Kr' : 1.03, 'X' : 0.77 }
```

# Взаємодія електромагнітного поля з молекулами

## Лекції з квантової хімії

Пономаренко С. М.



Рівняння Шредінгера для атомів та молекул показує, що атомно-молекулярна система має стаціонарні стани. Випромінювання та поглинання електромагнітної енергії відбувається в результаті переходу між цими станами, а величина кванта дорівнює різниці енергій цих рівнів:

$$\hbar\omega = E_m - E_n.$$

Остання формула носить назву правила частот Бора.

*Правило частот Бора* — умова, необхідна для переходу з одного стану в інший, проте вона не є достатньою: перехід може задовольняти цій вимозі, але бути малоямовірним. Відповідна лінія (або смуга) може мати дуже низьку інтенсивність або навіть не спостерігатися у спектрах. Такі переходи називаються забороненими.

# Дипольний момент переходу

import numpy as np

Поглинання випромінювання — це взаємодія **електричної хвилі** з **електричним диполем** молекули.

**З квантової точки зору:** переход можливий лише тоді, коли **дипольний момент переходу** не дорівнює нулю:

$$\mathbf{p}_{12} = \langle \psi_1 | q\hat{\mathbf{r}} | \psi_2 \rangle = \int \psi_2^*(\mathbf{r}) q\hat{\mathbf{r}} \psi_1(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}$$

де  $\psi_1$ ,  $\psi_2$  — хвильові функції початкового та кінцевого станів;  $q\hat{\mathbf{r}}$  — оператор електричного дипольного моменту.

Цей інтеграл відображає середньозважене значення дипольного моменту для стану, що є суперпозицією  $\psi_1$  та  $\psi_2$ .

# Правила відбору та ймовірність переходу

```
import sys, math
```

```
## constants ##
```

**Дипольний момент переходу  $|p|$**  можна розглядати як амплітуду ймовірності переходу.

Його квадрат  $|p|^2$  є ймовірністю переходу.

Таким чином, можна сформулювати **правила відбору**:

- Перехід заборонений, якщо дипольний момент переходу  $p = 0$ ;
- Ймовірність дозволеного переходу пропорційна квадрату величини дипольного моменту:  $P \propto |p|^2$ .