

Teoria dos átomos em moléculas

A estrutura molecular hipótese - que uma molécula é um conjunto de átomos ligados por uma rede de ligações - foi forjado no cadinho da química experimental do século XIX. Ele continuou a servir como o principal meio de ordenar e classificar as observações da química. A dificuldade com essa hipótese era de que ele não estava relacionada diretamente com a mecânica quântica, a física que rege os movimentos dos núcleos e elétrons que compõem os átomos e as ligações. Na verdade não havia, e com alguma ainda há, uma opinião predominante de que estes conceitos fundamentais, enquanto indubitavelmente úteis, foram além da definição teórica. Temos em química um entendimento com base em um esquema de classificação que é simultaneamente forte e, ao mesmo tempo, por causa da sua natureza empírica, limitada.

Richard Feynman e Julian Schwinger nos deram uma reformulação da física que permite que se colocam e responder às perguntas "o que é um átomo em uma molécula e como se prever suas propriedades?" Estas questões foram colocadas no meu laboratório, onde foi demonstrado que esta nova formulação da física, quando aplicado à topologia observado da distribuição de carga eletrônica no espaço real, proporciona uma única partição do sistema como um todo em alguns um conjunto de regiões espaciais limitadas. A forma e as propriedades dos grupos assim definidos recuperar fielmente as características atribuídas aos átomos e grupos funcionais de química. Ao estabelecer esta associação, a hipótese de estrutura molecular é libertado de suas limitações empíricas e do poder de previsão completa da mecânica quântica pode ser incorporado a teoria resultante - uma teoria de átomos em moléculas e cristais.

A teoria recupera os conceitos operacionais centrais da hipótese de estrutura molecular, a de um agrupamento funcional de átomos com um aditivo e conjunto característico das propriedades, juntamente com a definição dos laços que unem os átomos e transmitir a estrutura. Não só a teoria, assim, quantificar e proporcionar o entendimento físico dos conceitos existentes de química, que possibilita novas aplicações da teoria. Estas novas aplicações acabará por permitir um para executar em um computador, de forma paralela diretamente experiência, tudo o que agora pode ser feito em laboratório, mas mais rapidamente e de forma mais eficiente, por que liga os grupos funcionais da teoria. Estas aplicações incluem a concepção e síntese de novas moléculas e novos materiais com propriedades específicas desejadas.

A teoria dos átomos nas moléculas permite que se tire vantagem da observação individual mais importante da química, que de um grupo funcional com um conjunto

característico de propiedades.