

## ВЗАИМОСВЯЗЬ КВАНТОВОЙ ХИМИИ И ТОПОЛОГИИ КАК СОВРЕМЕННЫЙ ОТРАСЛЬ НАУКИ И ПОНЯТИЕ ТОПОЛОГИЧЕСКОГО АТОМА

Содикхужаева Шахноза Хурсанжон кизи  
преподаватель, Ферганский Политехнический Институт  
E-mail: [shahnoza2019@gmail.com](mailto:shahnoza2019@gmail.com)

### Аннотация

В данной работе рассмотрены и изучены основы квантовой химической топологии, общая взаимосвязь топологии как раздела математики и химии. Обсуждены четыре основных вклада энергии, а также дано понятие топологического атома.

**Ключевые слова:** квантовая химическая топология, молекулярная система, энергия, уравнение Шредингера, топологический атом.

### Введения

Квантовая химия зародилась в середине 20-х годов XX столетия. Её становление шло параллельно с развитием квантовой механики, служащей фундаментом для перспективной молодой науки. Весьма любопытным является тот факт, что основные приёмы и методы квантовой химии, реализуемые в алгоритмах таких современных вычислительных программ, были разработаны за очень короткий промежуток времени – около 10 лет. Столь резкий взлёт объясняется уникальным стечением следующих обстоятельств [1-7].

Чем дальше продвигались химики в изучении строения вещества, тем больше возникало у них вопросов. Почему из атомов водорода образуются только двухатомные молекулы? Почему молекула  $H_2O$  имеет форму треугольника, а в  $CO_2$  все три атома лежат на одной прямой? Почему состоящие из углерода алмаз – изолятор, а графит – проводник? Подобный список можно продолжать до бесконечности, но ведь эти вопросы относятся к свойствам уже известных веществ, а главная задача химии – получение новых соединений с наперёд заданными, нужными человеку свойствами [8-15]. В решении всех этих проблем важную роль играет относительно молодая наука – квантовая химия, которая не просто ещё одна ветвь химии (наряду с неорганической, органической, коллоидной и другими). Она служит для них теоретическим фундаментом, а её суть состоит в применении квантовой механики для определения как структуры атомов и молекул, так и их возможных превращений [16-31]. В принципе основное уравнение квантовой механики – уравнение Шредингера – можно записать для системы, состоящей из многих ядер и электронов (то есть для атомов, молекул, ионов, кристаллов), и его

решение в виде волновой функции полностью определит её строение и поведение. Основное препятствие состоит в том, что даже в случае всего двух электронов это уравнение точно не решается, а при увеличении их числа трудности многократно возрастают. Поэтому с самого начала квантовые химики столкнулись с необходимостью ввода каких-то упрощений [32-39]. Им пришлось создавать вычислительные методы, часто базирующиеся на нестрогих правилах, изобретательности и интуиции их авторов. А об эффективности метода судили по его способности объяснять уже известные факты и предсказывать новые. Тогда не существовало единой теории, способной объяснить широкий круг химических явлений. И вот в сотрудничестве с физикой химия стала превращаться в точную науку, перенимая её математический аппарат. В опубликованных на тот момент Эрвином Шрёдингером, Максом Борном и Вернером Гейзенбергом подробных математических выкладках по квантовой химии содержались формулы, которые можно было использовать для описания поведения электронов в атомах. Тем не менее электронная структура молекул поддавалась анализу с очень большим трудом, и в 1927 году Р.С. Малликен, работая с Ф. Хундом в Гёттингенском университете в Германии, предположил, что атомы соединяются в молекулы в процессе, называемом образованием химических связей, таким образом, что их внешние электроны ассоциируются с молекулой в целом [40-47]. Следовательно, внешние электроны молекулы, которые определяют многие из её важных свойств, находятся на молекулярных орбиталях, а не на орбиталях отдельных атомов. Р.С. Малликен доказал, что молекулярные орбитали могут быть описаны с помощью точных математических формул, благодаря чему можно до значительных деталей предсказать физические и химические свойства вещества. В 1966 году Р.С. Малликену была присуждена Нобелевская премия по химии «за фундаментальную работу по химическим связям и электронной структуре молекул, проведённую с помощью метода молекулярных орбиталей». «Метод молекулярных орбиталей означает совершенно новое понимание природы химических связей, – сказала Инга Фишер-Джалмар в своём вступительном слове от имени Шведской королевской академии наук. – Существовавшие ранее идеи исходили из представления, что образование химических связей зависит от полного взаимодействия между атомами. Метод молекулярных орбиталей, напротив, опираясь, на положения квантовой механики, отталкивается от взаимодействия между всеми атомными ядрами и всеми электронами молекулы. Этот метод внёс чрезвычайно важный вклад в понимание нами качественного аспекта образования химических связей и электронной структуры молекул». Ещё одной жемчужиной квантовой химии стала теория кристаллического поля, предложенная немецким учёным Гансом Бете в 1929 году. Квантовая химическая топология - это раздел теоретической химии, в котором используется язык динамических систем (например, аттрактор, бассейн, гомеоморфизм, градиентная траектория/фазовая кривая, сепаратриса, критические точки) для разделения химических систем и их характеристики с помощью связанных количественных свойств. Эта методология может быть применена к множеству квантово-механических функций, самой старой и наиболее задокументированной из которых является плотность электронов. Мы определяем и обсуждаем топологический атом и обосновываем название топология. Затем мы определяем квантовый атом без

ссылки на топологический атом. Впоследствии оказывается, что каждый топологический атом является квантовым атомом, и это свойство позволяет построить топологически вдохновленное силовое поле. Мы кратко обсудим четыре основных вклада энергии, управляющих этим разрабатываемым силовым полем, и то, как кригинг метода машинного обучения фиксирует изменение этих энергий из-за геометрических изменений. Наконец, в более философском стиле мы выступаем за фальсификацию в области химической интерпретации с помощью инструментов квантовой механики, вводя концепцию не вопроса.

Конечно, каждый может согласиться с тем, что внутри молекул есть атомы, точно так же, как внутри животного или растения есть живые клетки. Молекулы — это не новые агрегаты электронов и ядер, а скорее конструкции, основанные на заранее организованных объектах, называемых атомами. Точно так же животное не является совершенно новой формой жизни, а построено из специализированных клеток, каждая из которых представляет собой предварительно организованную (более элементарную) материю, такую как белки, липиды, углеводы и нуклеотиды. Некоторые механизмы производства энергии внутри одноклеточного существа такие же, как и в клетке животного. Аналогичным образом атомы в значительной степени сохраняют свою энергию, переходя из изолированного состояния в газовой фазе в существование внутри молекулы. Тогда сохранение атомов в ближнем мире — это именно то, чем занимается химия как наука: изучение того, как атомы изменяются при взаимодействии с другими атомами. Поэтому важно, чтобы атом внутри молекулы определялся и рассчитывался таким образом, чтобы он не слишком сильно менялся при переходе от газовой фазы к молекуле. Именно тогда человек восстанавливает настоящий химический атом, а не физический атом.

Химик находит атом, который позволяет ей, или, что более современно, ему, изолировать, как атом взаимодействует с другими атомами вместо того, чтобы отвлекаться на то, как этот атом был построен с нуля (то есть электроны и ядро). Только физика заинтересована в построении атома из его составляющих. Химия фокусируется на небольших изменениях, которые претерпевает атом при взаимодействии с другими атомами, малых по сравнению с энергетическими изменениями, связанными с построением атома из электронов и ядра (все вместе взятых из бесконечности). Теперь вопрос заключается в том, как определить атом внутри молекулярной системы, и здесь, к сожалению, мнения расходятся. Никакой эксперимент не помогает решить спорный вопрос о том, как определить атом, и даже если бы такой эксперимент был, интерпретация его измеренного сигнала, вероятно, была бы столь же спорной. Отсюда видно, что ответ на главный вопрос химии — что такое атом в молекуле? — может быть дан только теоретически. Важным ориентиром для оценки теоретических предположений о том, чем на самом деле является атом внутри молекулы, является энергетическая переносимость этого атома. Энергия так же важна, как и плотность электронов. Уравнение Шредингера представляет энергию и волновую функцию как простые величины, соединенные в тазобедренном суставе и имеющие одинаковый статус. Для каждого собственного значения (энергии) существует собственная функция (волновая функция), и обе они представляют собой неразрывную пару. Поскольку

плотность электронов непосредственно вытекает из волновой функции, молекулярная плотность электронов и энергия молекулы также являются двойниковыми. Следовательно, поскольку эта электронная плотность имеет первостепенное значение в силу первой теоремы Хоэнберга-Кона, энергия разделяет это значение. Действительно, энергия отвечает за то, как ведет себя молекулярная система, и поэтому ее понимание имеет решающее значение. Такие явления, как стерические затруднения, в конечном счете сводятся к энергетическим соображениям, даже если стерические явления кажутся неустраняемыми интуитивно (исходя из повседневного жизненного опыта). Естественный способ понять что-то (по крайней мере, в западной традиции ведения науки) — это изучить его части. Такой подход требует пространственного разделения энергии.

Ключевой вопрос заключается в том, как определить молекулярный фрагмент, который имеет четко определенную кинетическую энергию. Этот вопрос решается, начиная с локальной кинетической энергии, которая представляет собой кинетическую энергию в конкретной точке на единицу объема. Таким образом, эта величина представляет собой плотность кинетической энергии, которая при интегрировании по объему дает кинетическую энергию электронов в этом объеме. Затем кинетическая энергия молекулярного фрагмента получается из трехмерного интеграла плотности кинетической энергии по объему этого фрагмента. Однако существует практическая проблема, заключающаяся в том, что не существует «плотности» кинетической энергии; в лучшем случае имеется «а» плотность кинетической энергии. Мы пишем «в лучшем случае», потому что, если исходить из функции распределения квазивероятностей, квантово-механическое рассмотрение кинетической энергии, разделенной или нет, на самом деле проблематично. Тогда локальная кинетическая энергия неоднозначна. Однако в рамках парадигмы называют «лапласово семейство локальных кинетических энергий», нижеследующий вывод справедлив.

Определение атома в терминах топологии электронной плотности не является ни действительным, ни полезным, если его свойства не предсказываются квантовой механикой. Фундаментальная природа атома как структурного элемента материи следует из демонстрации совпадения топологического и квантового определений атома. Альтернативно атом можно определить как область реального пространства, ограниченную поверхностями, через которые проходит нулевой поток в градиентном векторном поле электронной плотности. Это ясно из рисунка 5, на котором показано, что межатомная поверхность определяется набором траекторий, заканчивающихся в точке, где  $\nabla p(r) = 0$ . Таким образом, межатомная поверхность удовлетворяет граничному условию «нулевого потока», указанному в уравнении:

$$\nabla p(r_s) \cdot n(r_s) = 0, \text{ для каждой точки } r_s \text{ на поверхности } S(r_s).$$

$n(r_s)$  единичный вектор нормали к поверхности в точке  $r_s$ . Другими словами, поверхность не пересекают никакие траектории  $\nabla p(r)$ . Атом, как составная часть какой-то более крупной системы, сам по себе является открытой системой, подверженной потокам заряда и импульса через его ограничивающую поверхность.

## Литература

1. Popelier, P. L. (2016). Quantum chemical topology. *The chemical bond II*, 71-117.
2. Bader, R. F. (1991). A quantum theory of molecular structure and its applications. *Chemical Reviews*, 91(5), 893-928.
3. Popelier, P. L. (2005). Quantum chemical topology: on bonds and potentials. *Intermolecular forces and clusters I*, 1-56.
4. Файзуллаев, Ж. И. (2020). Методика обучения ортогональных проекций геометрического тела в координатных плоскостях на основе развития математической компетентности. *Вестник Ошского государственного университета*, (1-4), 285-289.
5. Файзуллаев, Д. И. (2022). Развитие профессиональной компетентности студентов технических высших учебных заведений на основе деятельностного подхода. *Central asian journal of mathematical theory and computer sciences*, 3(10), 102-107.
6. Файзуллаев, Ж. И. (2022). Техника олий таълим муассасалари талабаларининг математик компетенциясини ривожлантириш математик таълим сифатини оширишнинг асоси сифатида. *Pedagogs jurnali*, 9(2), 248-256.
7. Abdujabbor, A., & Nabiyevich, F. A. (2022). Econometric Assessment of the Perspective of Business Entities. *Eurasian Journal of Physics, Chemistry and Mathematics*, 8, 25-29.
8. Абдуразаков, А., Фозилов, А. Н., & Ташпулатов, А. (2021). Некоторые вопросы оптимизации рынка труда. *The Scientific Heritage*, (76-2), 29-32.
9. Расулов, Р., Сатторов, А., & Махкамова, Д. (2022). Вычисление Квадрат Нормы Функционала Погрешности Улучшенных Квадратурных Формул В Пространстве. *Central asian journal of mathematical theory and computer sciences*, 3(4), 114-122.
10. Rashidjon, R., & Sattorov, A. (2021). Optimal Quadrature Formulas with Derivatives in the Space. *Middle European Scientific Bulletin*, 18, 233-241.
11. Abdujabbor, A., Nasiba, M., & Nilufar, M. (2022). The Numerical Solution of Gas Filtration in Hydrodynamic Interconnected Two-Layer Reservoirs. *Eurasian Journal of Physics, Chemistry and Mathematics*, 6, 18-21.
12. Абдуразаков, А., Махмудова, Н. А., & Мирзамахмудова, Н. Т. (2022). Об одном численном решении краевых задач для вырождающихся параболических уравнений имеющие приложения в теории фильтрации. *Universum: технические науки*, (5-1 (98)), 41-45.
13. Abdujabbor, A., Nasiba, M., & Nilufar, M. (2022). Semi-discretization method for solving boundary value problems for parabolic systems. *Texas Journal of Multidisciplinary Studies*, 13, 77-80.
14. Abdurazaqov, A., & Mirzamahmudova, N. T. (2021). Convergence of the method of straight lines for solving parabolic equations with applications of hydrodynamically unconnected formations. *Ministry Of Higher And Secondary Special Education Of The*

*Republic Of Uzbekistan National University Of Uzbekistan Uzbekistan Academy Of Sciences VI Romanovskiy Institute Of Mathematics, 32.*

15. Абдуразаков, А., Махмудова, Н. А., & Мирзамахмудова, Н. Т. (2021). Численное решение краевых задач для вырождающихся уравнений параболического типа, имеющих приложения в фильтрации газа в гидродинамических невзаимосвязанных пластах. *Universum: технические науки*, (10-1 (91)), 14-17.
16. Далиев, Б. С. (2021). Оптимальный алгоритм решения линейных обобщенных интегральных уравнений Абеля. *Проблемы вычислительной и прикладной математики*, 5(35), 120-129.
17. Акбаров, Д. Е., Абдуразаков, А., & Далиев, Б. С. (2021). О Функционально Аналитической Формулировке И Существования Решений Системы Эволюционных Операторных Уравнений С Краевыми И Начальными Условиями. *Central asian journal of mathematical theory and computer sciences*, 2(11), 14-24.
18. Kosimova, M. Y., Yusupova, N. X., & Kosimova, S. T. (2021). Бернулли тенгламасига келтирилиб ечиладиган иккинчи тартибли оддий дифференциал тенглама учун учинчи чегаравий масала. *Oriental renaissance: Innovative, educational, natural and social sciences*, 1(10), 406-415.
19. Yusupova, N. K., & Abduolimova, M. Q. (2022). Use fun games to teach geometry. *Central asian journal of mathematical theory and computer sciences*, 3(7), 58-60.
20. Yusupova, N. X., & Nomoanjonova, D. B. (2022). Innovative technologies and their significance. *Central asian journal of mathematical theory and computer sciences*, 3(7), 11-16.
21. Shakhnoza, S. (2022). Application of Topology in Variety Fields. *Eurasian Journal of Physics, Chemistry and Mathematics*, 11, 63-71.
22. Bozarov, B. I. (2019). An optimal quadrature formula with  $\sin x$  weight function in the Sobolev space. *Uzbekistan academy of sciences vi romanovskiy institute of mathematics*, 47.
23. Akbarov, D. E., Kushmatov, O. E., Umarov, S. A., Bozarov, B. I., & Abduolimova, M. Q. (2021). Research on General Mathematical Characteristics of Boolean Functions' Models and their Logical Operations and Table Replacement in Cryptographic Transformations. *Central asian journal of mathematical theory and computer sciences*, 2(11), 36-43.
24. Shavkatjon o'g'li, T. B. (2022). Proving The Inequalities Using a Definite Integral and Series. *Texas Journal of Engineering and Technology*, 13, 64-68.
25. Shavkatjon o'g'li, T. B. (2022). Some integral equations for a multivariable function. *Web of Scientist: International Scientific Research Journal*, 3(4), 160-163.

26. Alimjonova, G. (2021). Modern competencies in the techno-culture of future technical specialists. *Current research journal of pedagogics*, 2(06), 78-84.
27. Kupaysinova, Z. S. (2022). Attempts of Central Asian Scholars to Prove Euclid's Fifth Postulate. *Eurasian Journal of Physics, Chemistry and Mathematics*, 12, 71-75.
28. Yakubjanovna, Q. M. (2022). Some Methodological Features of Teaching the Subject «Higher Mathematics» in Higher Educational Institutions. *Eurasian Journal of Physics, Chemistry and Mathematics*, 4, 62-65.
29. Abdurahmonovna, N. G. (2022). Factors for the Development of Creativity and Critical Thinking in Future Economists Based on Analytical Thinking. *Journal of Ethics and Diversity in International Communication*, 2(5), 70-74.
30. Abdurahmonovna, N. G. (2022). Will Be on the Basis of Modern Economic Education Principles of Pedagogical Development of Analytical Thinking in Economists. *European Multidisciplinary Journal of Modern Science*, 6, 627-632.
31. Nazarova, G. A. (2022). Will be on the basis of modern economic education Principles of pedagogical development of analytical thinking in economists. *Journal of Positive School Psychology*, 9579-9585.
32. Назарова, Г. А. (2022). Аналитик тафаккурни ривожлантиришнинг педагогик зарурати. *Integration of science, education and practice. Scientific-methodical journal*, 3(3), 309-314.
33. Kosimova, M. Y. (2022). Talabalarni ta'lim sifatini oshirishda fanlararo uzviylikidan foydalanish. *Nazariy va amaliy tadqiqotlar xalqaro jurnali*, 2(2), 57-64.
34. Qosimova, M. Y., & Yusupova, N. X. (2020). On a property of fractional integro-differentiation operators in the kernel of which the meyer function. *Scientific-technical journal*, 24(4), 48-50.
35. Mirzakarimov, E. M., & Fayzullaev, J. S. (2020). Improving the quality and efficiency of teaching by developing students\* mathematical competence using the animation method of adding vectors to the plane using the maple system. *scientific bulletin of namangan state university*, 2(9), 336-342.
36. Mirzakarimov, E. M., & Faizullaev, J. I. (2019). Method of teaching the integration of information and educational technologies in a heterogeneous parabolic equation. *scientific bulletin of namangan state university*, 1(5), 13-17.
37. Mirzaboevich, M. E. (2021). Using Maple Programs in Higher Mathematics. Triangle Problem Constructed on Vectors in Space. *Central asian journal of mathematical theory and computer sciences*, 2(11), 44-50.
38. Мирзакаримов, Э. М., & Файзуллаев, Д. И. (2021). Выполнять Линейные Операции Над Векторами В Пространстве В Системе Maple. *Central asian journal of mathematical theory and computer sciences*, 2(12), 10-16.

39. Мирзакаримов, Э. М. (2022). Использовать Систему Maple Для Определения Свободных Колебаний Прямоугольной Мембраны При Начальных Условиях. *Central Asian Journal Of Mathematical Theory And Computer Sciences*, 3(1), 9-18.
40. Мамаюсупов, Ж. Ш. (2022). Интегральное преобразование Меллина для оператора интегродифференцирования дробного порядка. *Periodica Journal of Modern Philosophy, Social Sciences and Humanities*, 11, 186-188.
41. Mamayusupov, J. S. O. (2022). “Iqtisod” yo’nalishi mutaxassislarini tayyorlashda matematika fanini o’qitish uslubiyoti. *Academic research in educational sciences*, 3(3), 720-728.
42. Qo’ziyev, S. S., & Mamayusupov, J. S. (2021). Umumiy o’rta ta’lim maktablari uchun elektron darslik yaratishning pedagogik shartlari. *Oriental renaissance: Innovative, educational, natural and social sciences*, 1(10), 447-453.
43. Kosimov, K., & Mamayusupov, J. (2019). Transitions melline integral of fractional integrodifferential operators. *Scientific Bulletin of Namangan State University*, 1(1), 12-15.
44. Qosimova, S. T. (2021). Two-point second boundary value problem for a quadratic simple second-order differential equation solved by the bernoulli equation. *Innovative Technologica: Methodical Research Journal*, 2(11), 14-19.
45. Jalilov, I. I. U. (2022). К актуальным проблемам становления педагогического мастерства преподавателя. *Nazariy va amaliy tadqiqotlar xalqaro jurnali*, 2(9), 81-89.
46. Jalilov, I. (2019). To the problems of innovation into the educational process. *Scientific Bulletin of Namangan State University*, 1(3), 344-347.
47. Акбаров, Д. Е., Кушматов, О. Э., Умаров, Ш. А., & Расулов, Р. Г. (2021). Исследования Вопросы Необходимых Условий Крипто Стойкости Алгоритмов Блочного Шифрования С Симметричным Ключом. *Central asian journal of mathematical theory and computer sciences*, 2(11), 71-79.