

Chimica quantistica

Approfondimenti	Info
<i>Quest'argomento non è collegato ad altri approfondimenti correlati. Si consiglia, in ogni caso, di controllare sempre [l'Indice] degli Approfondimenti</i>	<i>Questa pagina è solo improntata in attesa di completamento da parte dei Collaboratori. Se sei interessato a collaborare attivamente con Extrapedia, leggi come fare [Collabora]</i>

La **Chimica quantistica** è una branca della [Chimica](#) il cui obiettivo principale è l'applicazione della [Meccanica quantistica](#) nei modelli fisici e negli esperimenti di sistemi chimici. È anche chiamata Meccanica quantistica molecolare.

I chimici quantistici sperimentalmente fanno molto affidamento sulla spettroscopia, attraverso la quale si possono ottenere informazioni sulla quantizzazione dell'energia su scala molecolare. Metodi comuni sono la spettroscopia a infrarossi (IR), la spettroscopia a risonanza magnetica nucleare (NMR) e la microscopia a scansione.

La chimica quantistica teorica, il cui funzionamento tende anche a rientrare nella categoria della [Chimica computazionale](#), cerca di calcolare le previsioni della teoria quantistica come gli atomi e le molecole possono avere solo energie discrete; poiché questo compito, quando applicato a specie poliatomiche, richiama il problema di molti corpi, questi calcoli sono eseguiti usando il computer piuttosto che i metodi analitici di "back of the envelope".

Coinvolge l'interazione pesante di metodi sperimentali e teorici. In questi modi, i chimici quantistici indagano sui fenomeni chimici.

La Chimica quantistica studia lo stato fondamentale di singoli atomi e molecole, gli stati eccitati e quelli di transizione che si verificano durante le reazioni chimiche.

Nei calcoli, gli studi di Chimica quantistica usano anche metodi semi-empirici e altri basati su principi della meccanica quantistica e affrontano problemi dipendenti dal tempo. Molti studi di chimica quantistica presuppongono che i nuclei siano a riposo ([Approssimazione di Born-Oppenheimer](#)). Molti calcoli riguardano interazioni che includono metodi di campo auto-consistenti. Gli obiettivi principali della Chimica quantistica includono una maggiore accuratezza dei risultati per i piccoli sistemi molecolari e l'aumento delle dimensioni di grandi molecole che possono essere processate, il che è limitato da considerazioni di ridimensionamento: il tempo di calcolo aumenta come potenza del numero di atomi.

"Qualora alcuni link non funzionassero, si prega di comunicarlo allo Staff - staff@extrapedia.org"

[risonanza](#)

From:
<http://extrapedia.org/> - **Extrapedia**

Permanent link:
http://extrapedia.org/db/chimica_quantistica

Last update: **13/04/2019 16:04**



