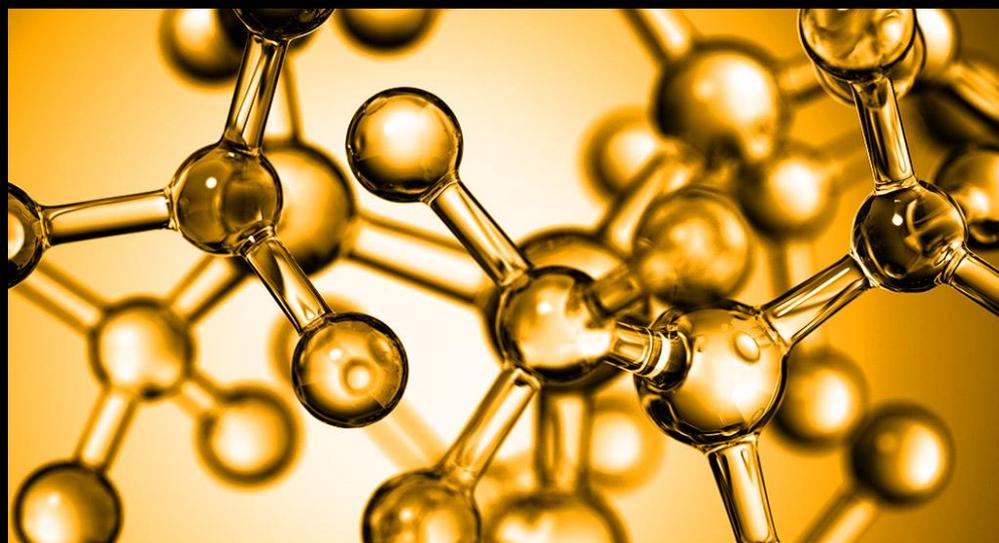


КВАНТОВАЯ ХИМИЯ



ХИМИЯ

```
graph TD; A[ХИМИЯ] --> B[ОРГАНИЧЕСКАЯ]; A --> C[НЕОРГАНИЧЕСКАЯ]
```

ОРГАНИЧЕСКАЯ

НЕОРГАНИЧЕСКАЯ

ХИМИЯ

ФИЗИЧЕСКАЯ

АНАЛИТИЧЕСКАЯ

ХИМИЧЕСКАЯ
КИНЕТИКА

ХИМИЧЕСКАЯ
ТЕРМОДИНАМИКА

ЭЛЕКТРОХИМИЯ

КВАНТОВАЯ
ХИМИЯ

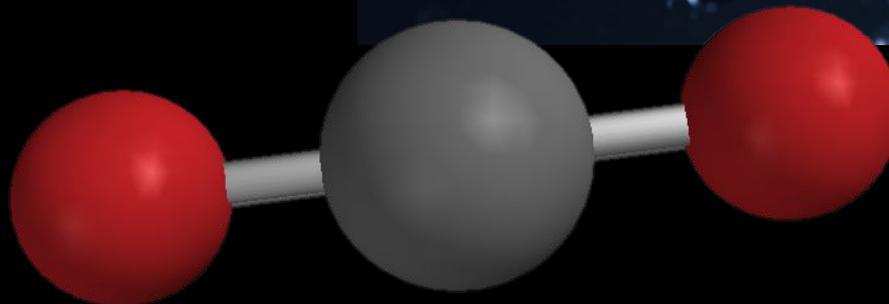
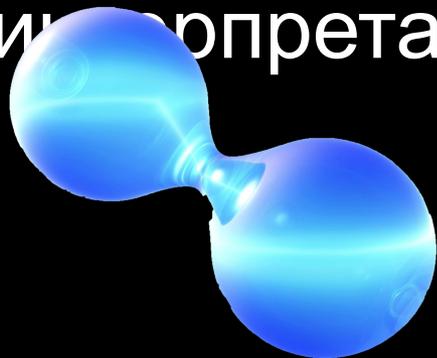
ИСТОРИЯ

Квантовая химия зародилась
в середине 20-х годов XX столетия.



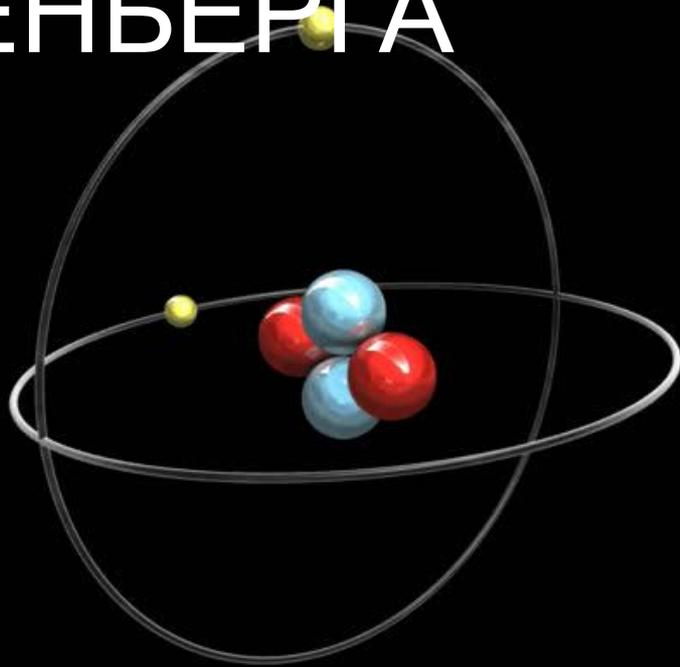
ПРИЧИНЫ ВОЗНИКНОВЕНИЯ

Экспериментальный материал
нуждался
в интерпретации



ИССЛЕДОВАНИЯ ВЕРНЕРА ГЕЙЗЕНБЕРГА

1926 г.



УРАВНЕНИЕ ШРЁДИНГЕР

А

Уравнение
описывает
изменение
в пространстве
и во времени
чистого состояния.



ГИПОТЕЗА ДЕ БРОЙЛЯ

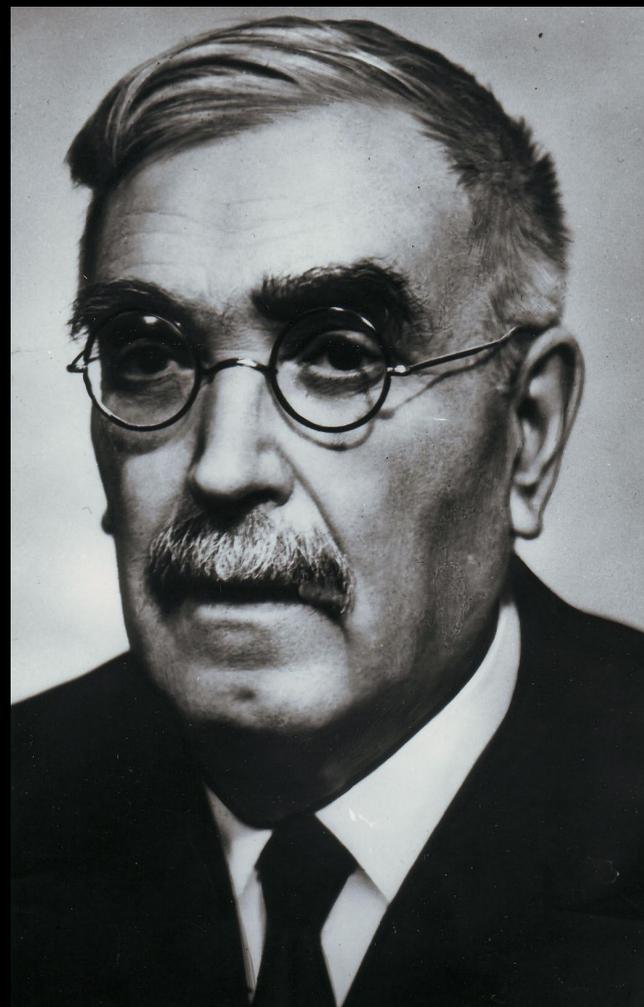
Дуализм не является особенностью только оптических явлений, а имеет универсальный характер. Частицы вещества также обладают волновыми свойствами



МЕТОД ХАРТРИ-ФОКА

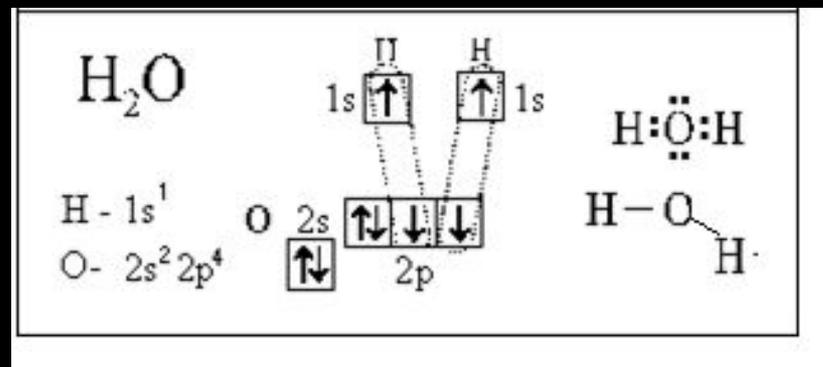
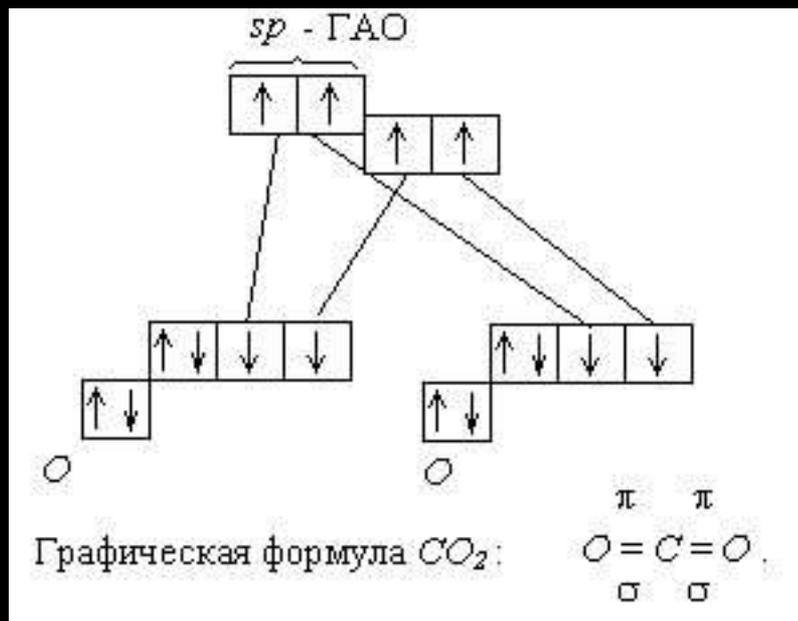


Дуглас Рейнер Хартри



Владимир Александрович
Фок

ТЕОРИЯ ВАЛЕНТНЫХ СВЯЗЕЙ



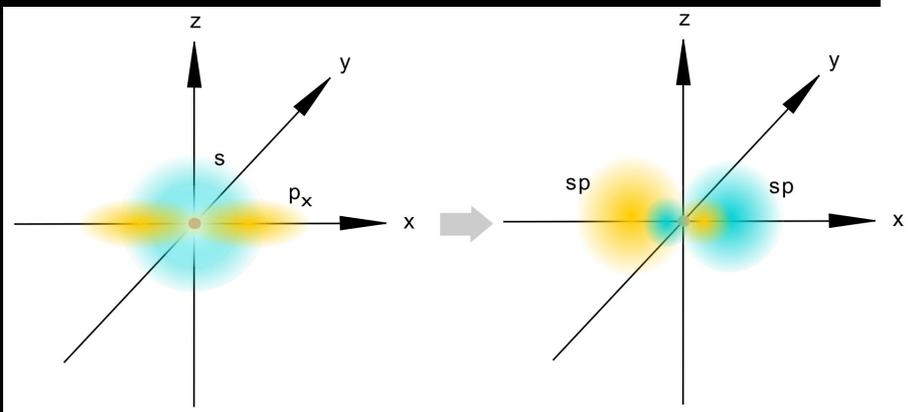
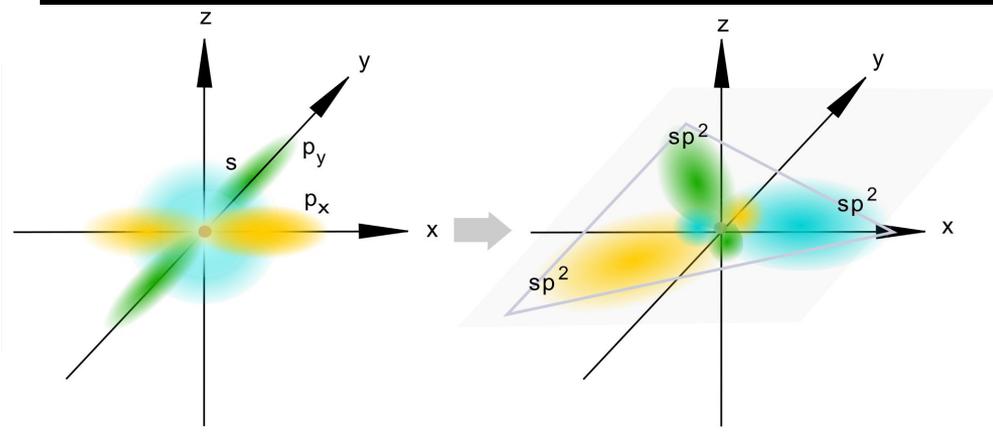
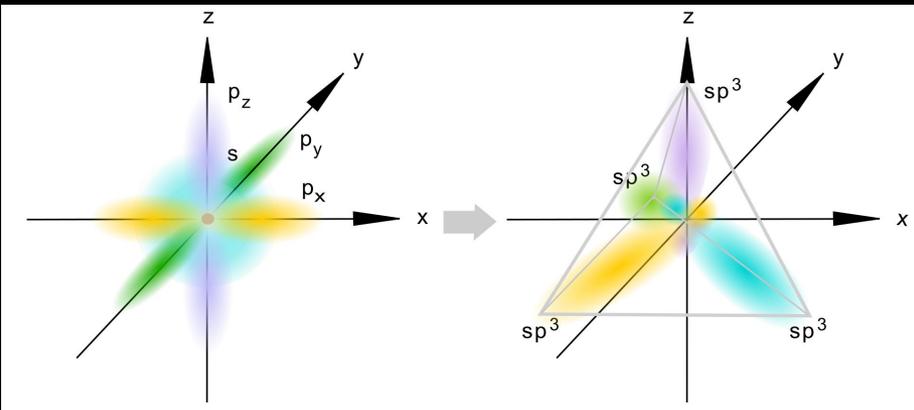


- относительная простота
- помогает легко представить молекулу
- описывает неорганическую химию



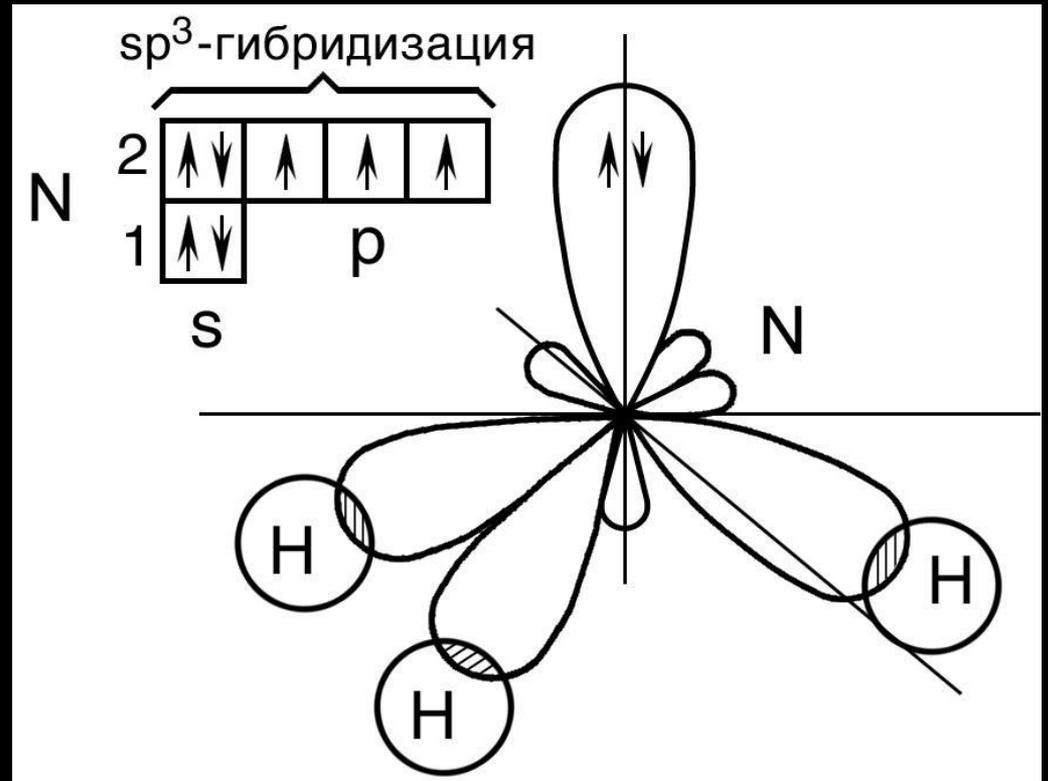
- даёт правильное описание в малой области химических соединений
- малая предсказательная способность
- не даёт магнитных свойств веществ и их геометрию

ГИБРИДИЗАЦИЯ



ТЕОРИЯ ГИЛЛЕСПИ

- NH₃-sp² гибридизация?

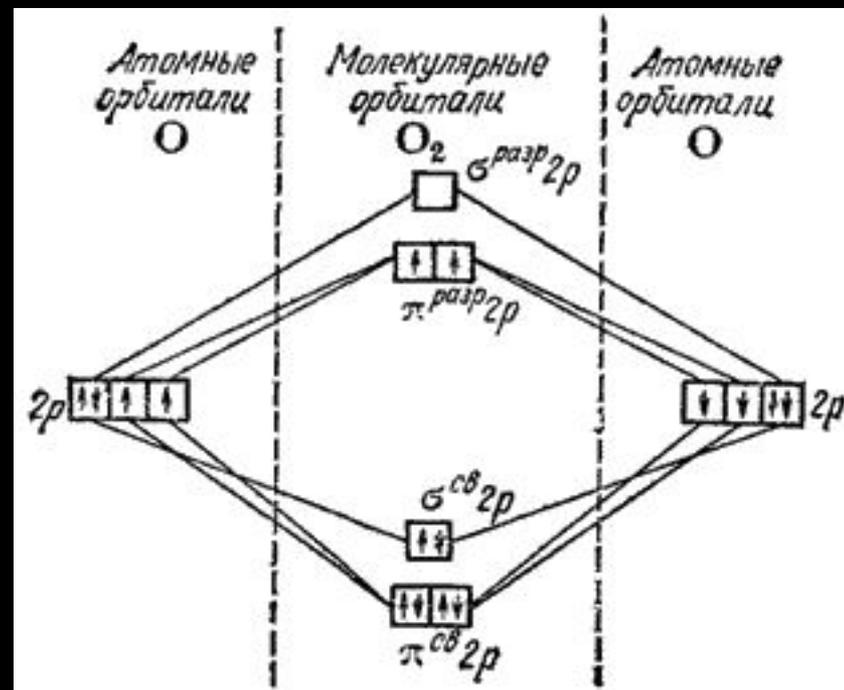


МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНЫХ ОРБИТАЛЕЙ

Является наиболее универсальным широко используемым методом описания природы химической связи. Этот метод базируется на последних достижениях в области квантовой механики.

МЕТОД ЛИНЕЙНОЙ КОМБИНАЦИИ АТОМНЫХ ОРБИТАЛЕЙ

-ПРОСТЕЙШИЙ МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ОРБИТАЛЕЙ.

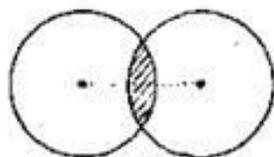


+

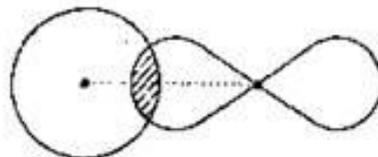
- даёт геометрию молекулы
- объективнее отражает реальность
- имеет сильную предсказательную способность, даже без расчёта
- предсказывает магнитные свойства молекул
- относительная простота математики



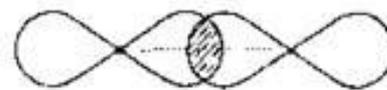
- сложность подбора коэффициента для атомной орбитали
- рост сложности расчёта молекул с ростом количества атомов



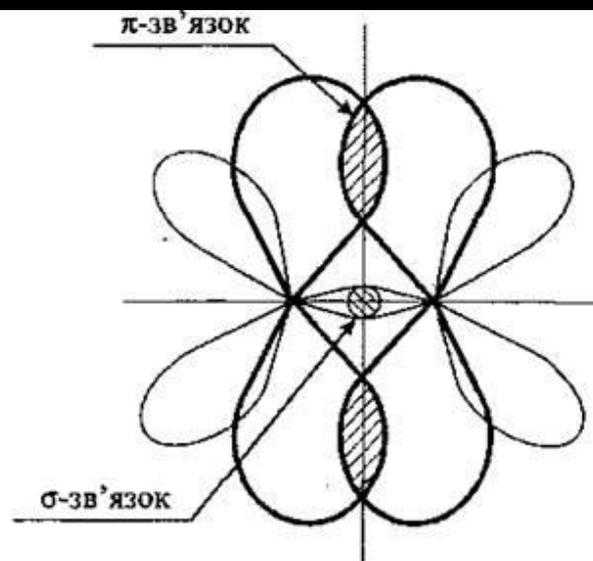
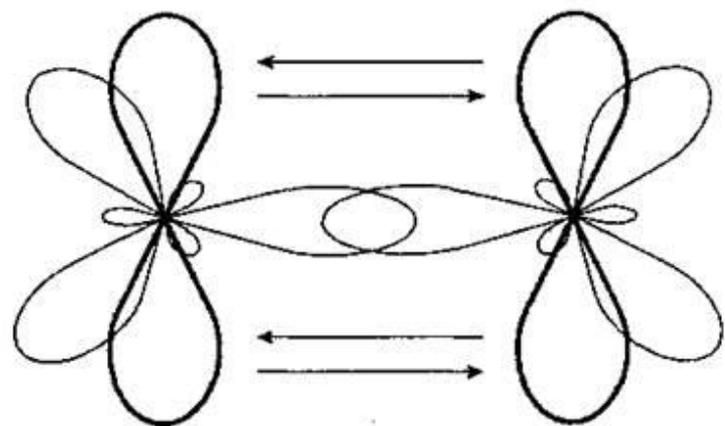
$s-s$ -перекривання (H-H)



$s-p$ -перекривання (H-F)



$p-p$ -перекривання (F-F)

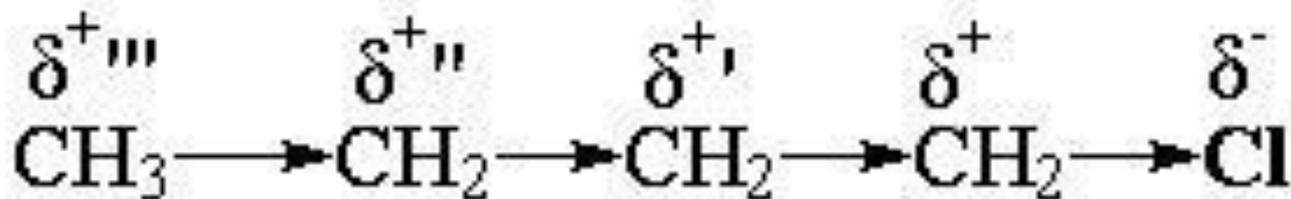


ЭЛЕКТРОННЫЕ ЭФФЕКТЫ

-смещение электронной плотности в молекуле, ионе или радикале под влиянием заместителей.

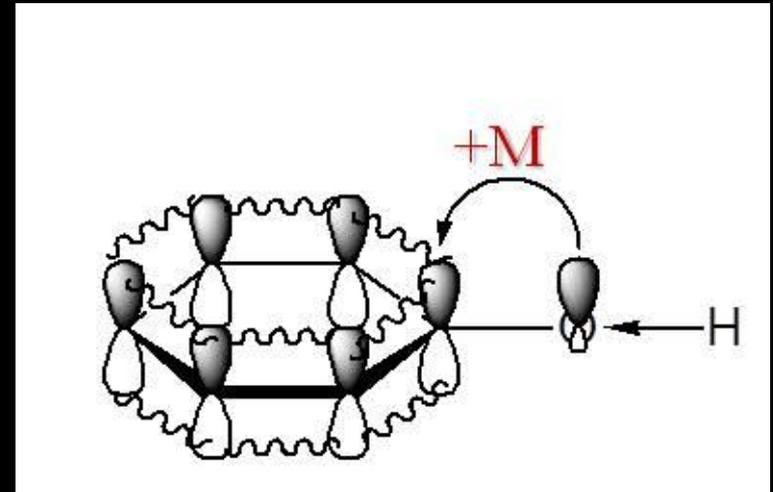
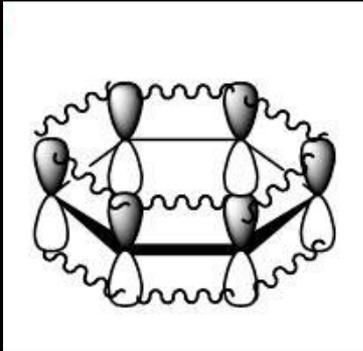
ИНДУКТИВНЫЙ ЭФФЕКТ

-эффект переноса электронной плотности вдоль сигма связей.



МЕЗОМЕРНЫЙ ЭФФЕКТ

-эффект переноса электронной плотности вдоль π связей.



ОБЛАСТИ ПРИМЕНЕНИЯ



- Для направленного создания материалов с заданными электрическими и магнитными свойствами.



- Для описания свойств и поиска новых материалов для наноэлектроники и наномедицины.





- Для расчета моделей биологических мембран, моделирования работы мышцы и т.д. в молекулярной биологии.