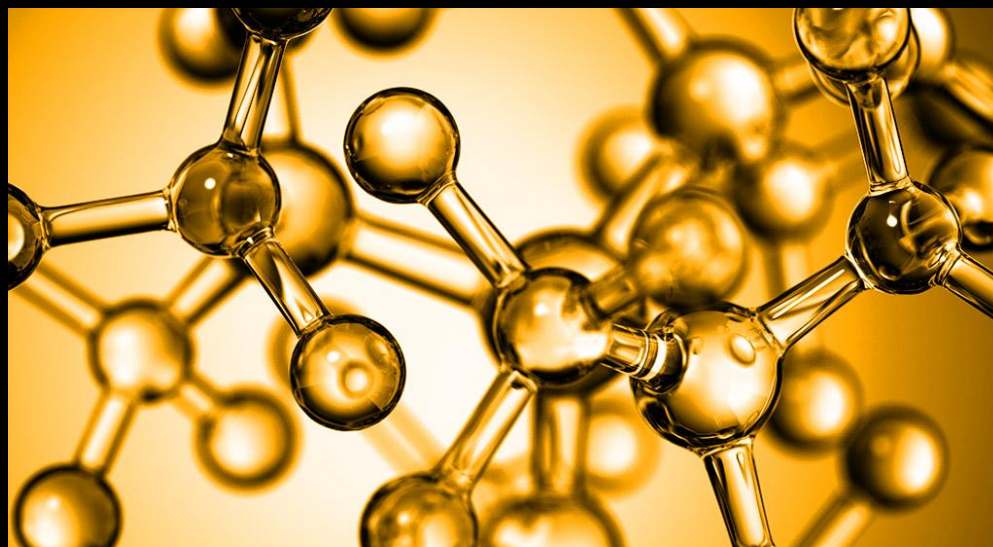


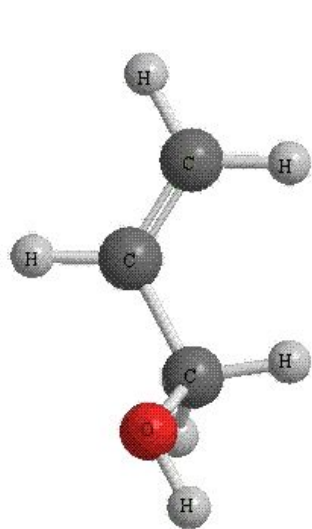
КВАНТОВАЯ ХИМИЯ



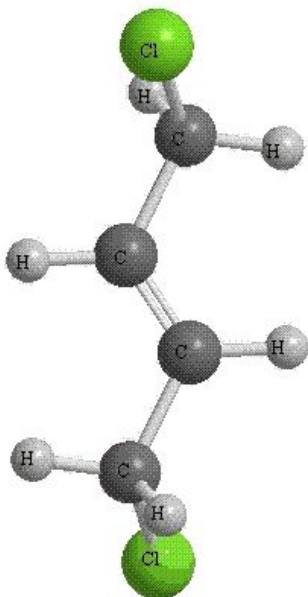
ХИМИЯ

ОРГАНИЧЕСКАЯ

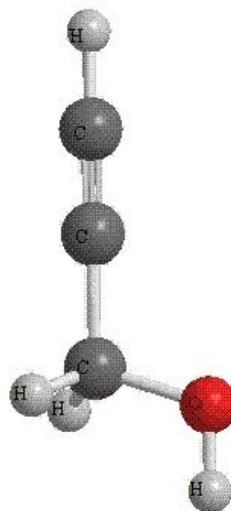
НЕОРГАНИЧЕСКАЯ



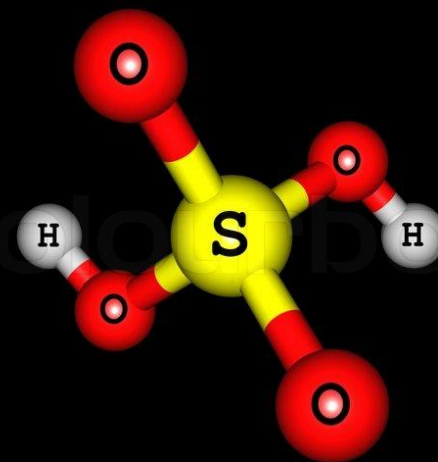
аллиловый спирт



дихлорбутен



пропаргиловый спирт



ХИМИЯ

ФИЗИЧЕСКАЯ

АНАЛИТИЧЕСКАЯ

ХИМИЧЕСКАЯ
КИНЕТИКА

ХИМИЧЕСКАЯ
ТЕРМОДИНАМИКА

ЭЛЕКТРОХИМИЯ

КВАНТОВАЯ
ХИМИЯ



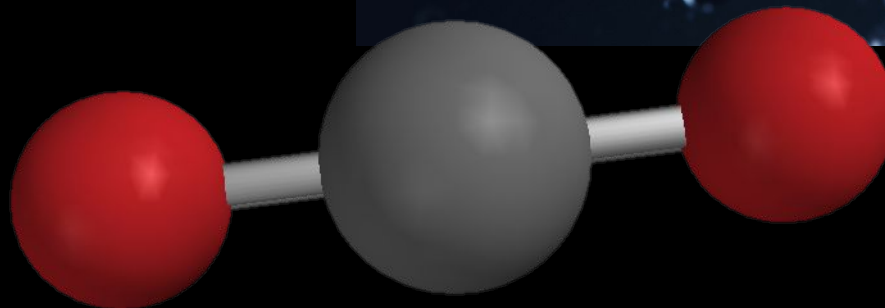
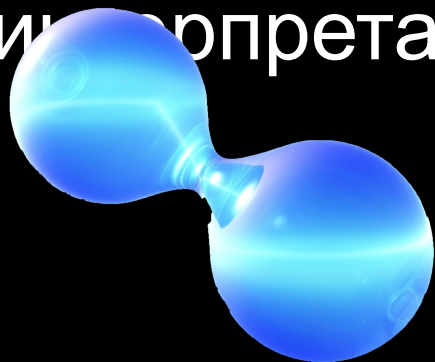
ИСТОРИЯ

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



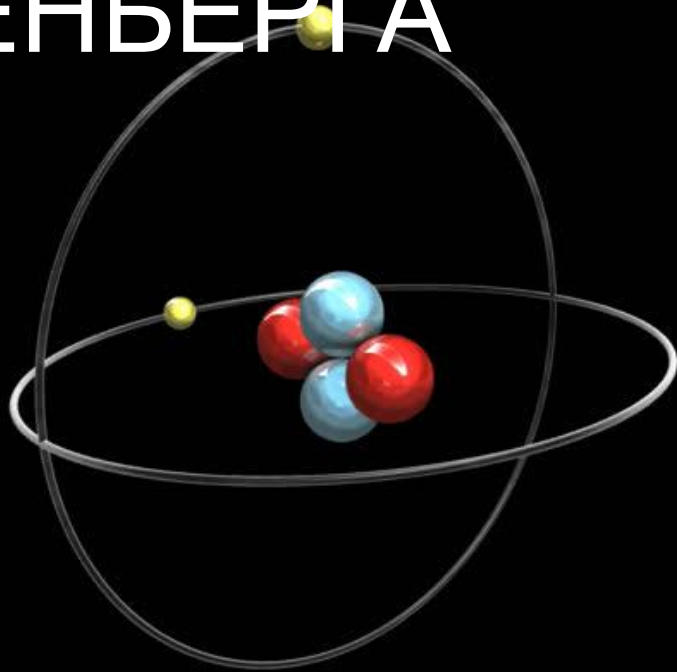
ПРИЧИНЫ ВОЗНИКНОВЕНИЯ

Экспериментальный материал
нуждался
в интерпретации



ИССЛЕДОВАНИЯ ВЕРНЕРА ГЕЙЗЕНБЕРГА

1926 г.



УРАВНЕНИЕ ШРЁДИНГЕР

А

Уравнение
описывает
изменение
в пространстве
и во времени
ЧИСТОГО СОСТОЯНИЯ.



Уравнение Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + U\psi = E\psi$$

или
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi = E\psi$$

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

(энергия – это у электрона всё).

Волновая функция ψ характеризует амплитуду электронной волны, а её квадрат ψ^2 – плотность вероятности нахождения электрона в определённой области пространства.

ГИПОТЕЗА ДЕ БРОЙЛЯ

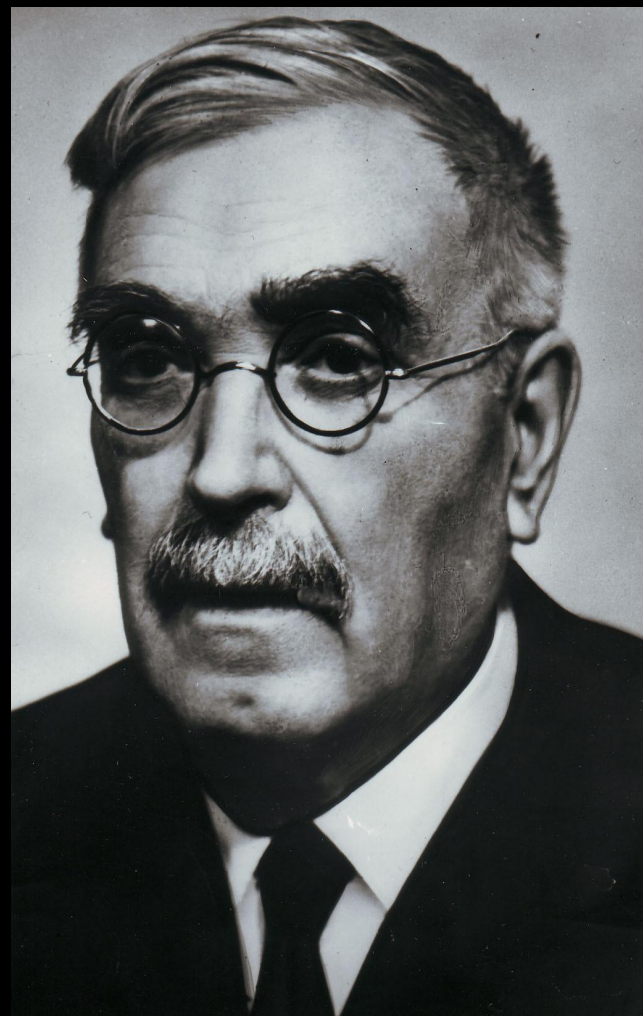
Дуализм не является особенностью только оптических явлений, а имеет универсальный характер. Частицы вещества также обладают волновыми свойствами



МЕТОД ХАРТРИ-ФОКА

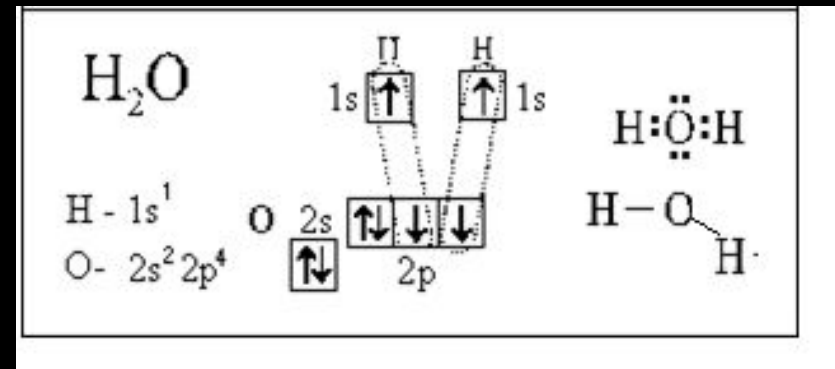
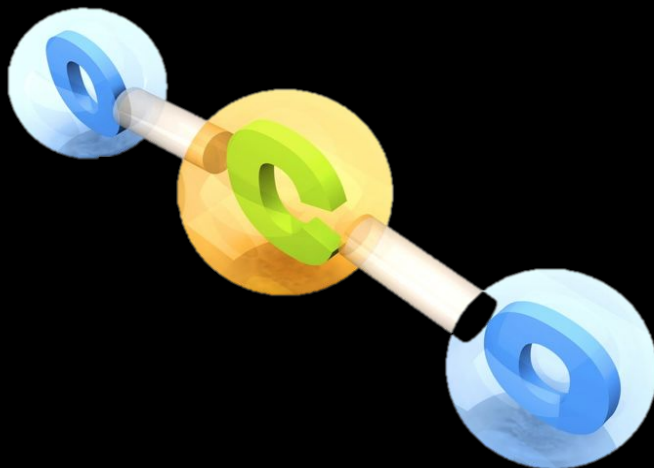
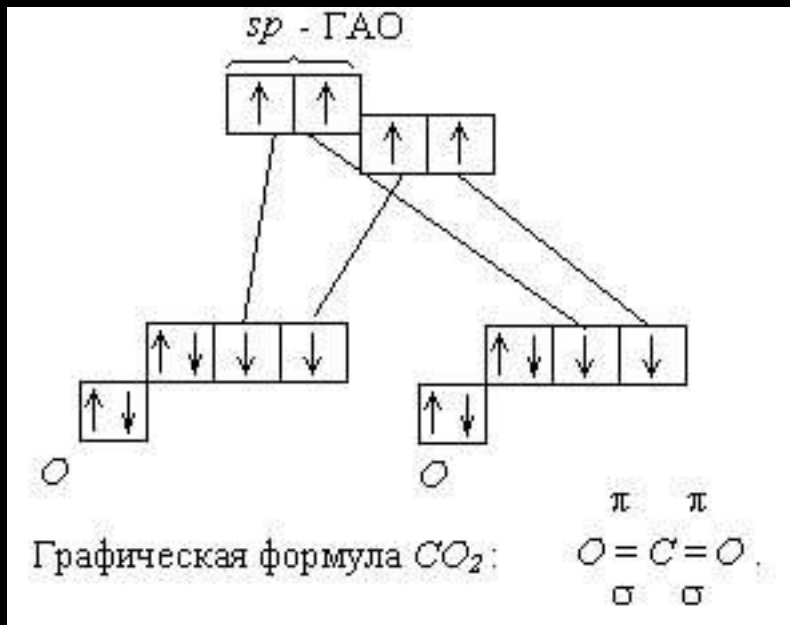


Дуглас Рейнер Хартри



Владимир Александрович
Фок

ТЕОРИЯ ВАЛЕНТНЫХ СВЯЗЕЙ

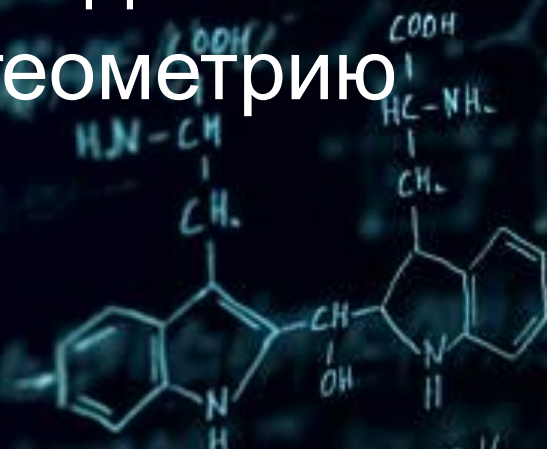




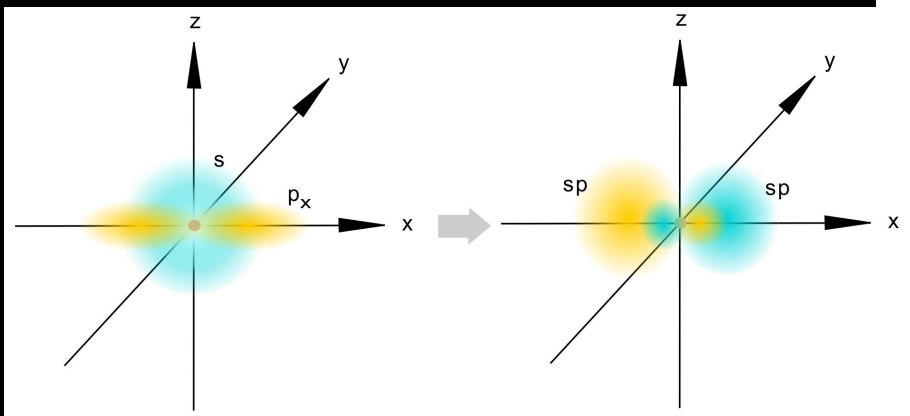
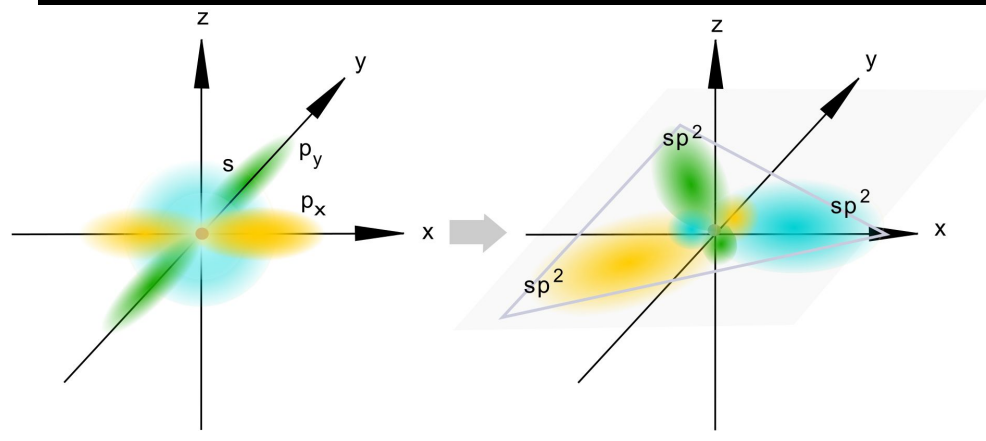
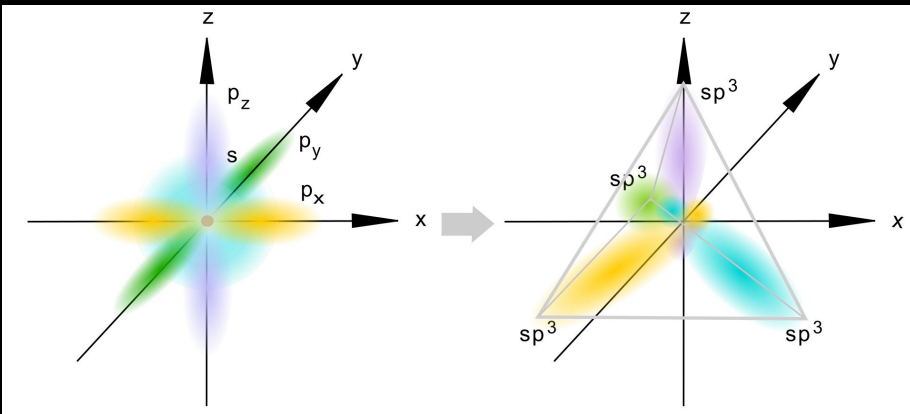
+

- 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

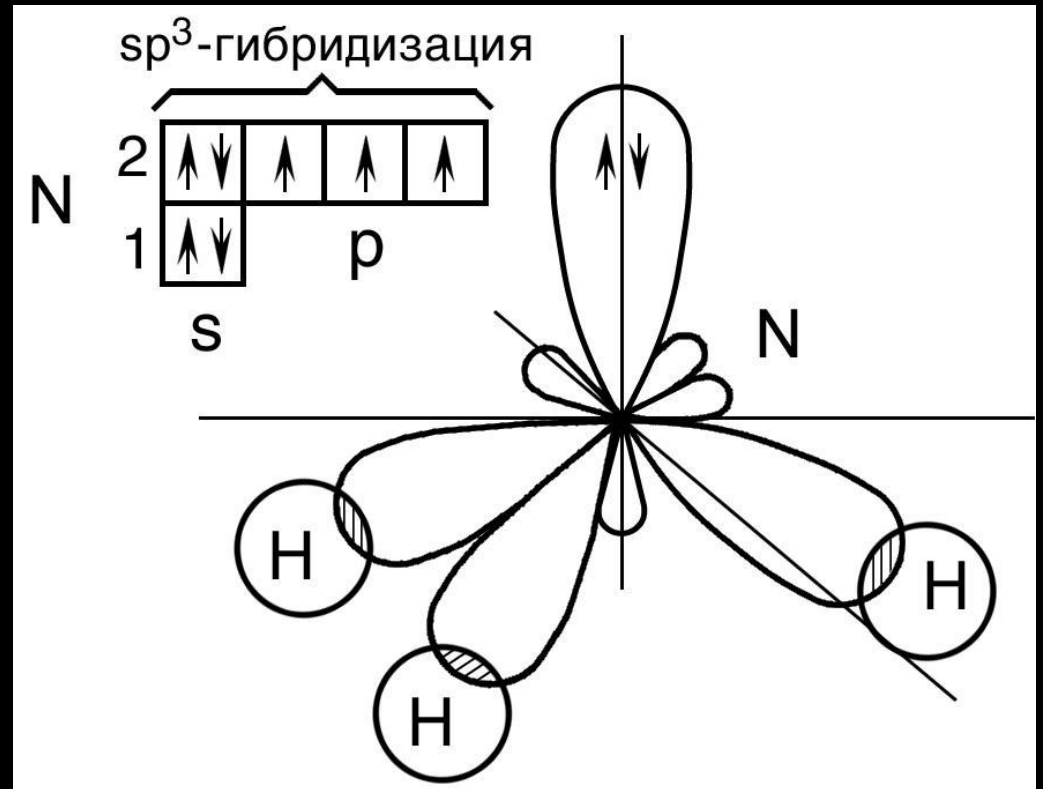


ГИБРИДИЗАЦИЯ



ТЕОРИЯ ГИЛЛЕСПИ

- NH₃-sp² гибридизация?

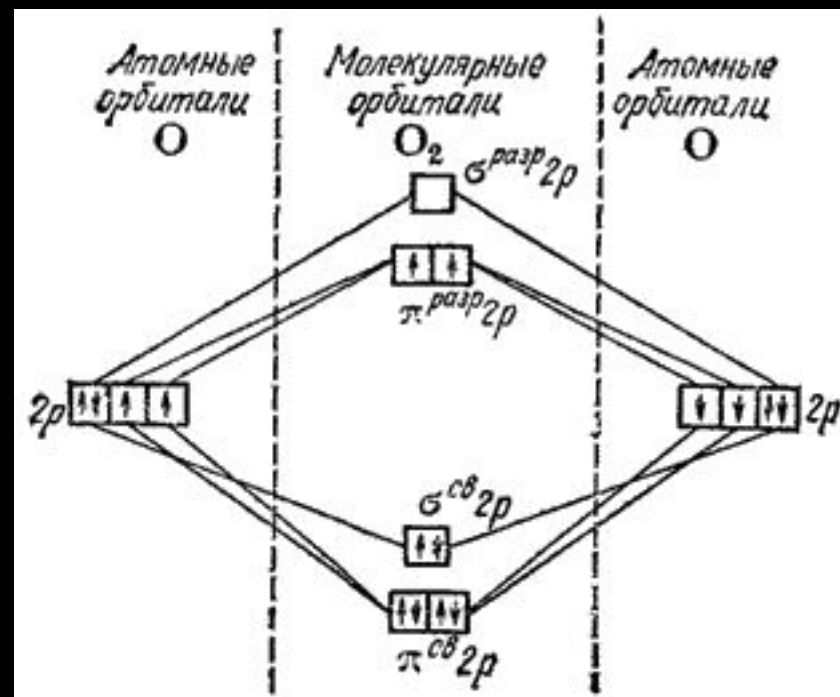


МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНЫХ ОРБИТАЛЕЙ

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.

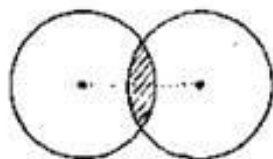


+

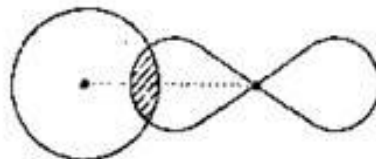
- даёт геометрию молекулы
- объективнее отражает реальность
- имеет сильную предсказательную способность, даже без расчёта
- предсказывает магнитные свойства молекул
- относительная простота математики

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

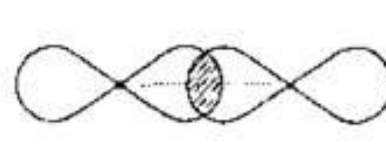




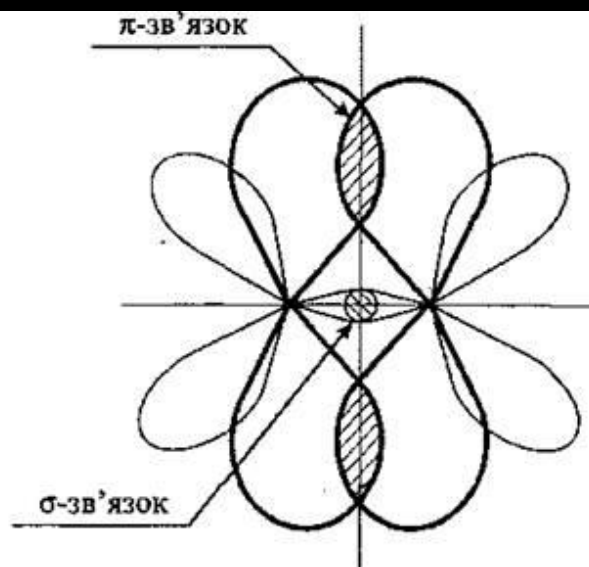
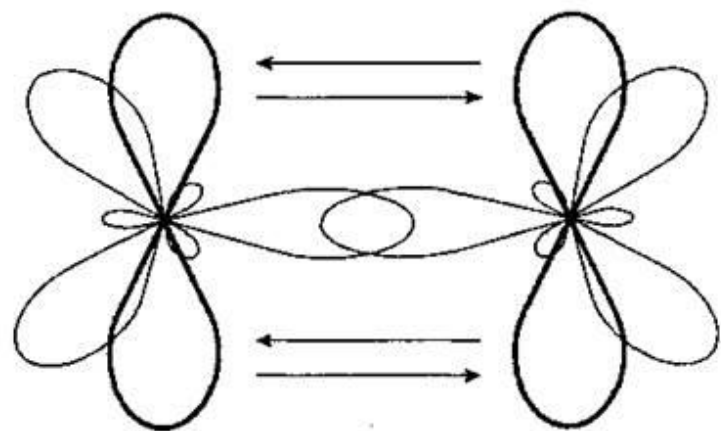
s-s-перекривання (H-H)



s-p-перекривання (H-F)



p-p-перекривання (F-F)

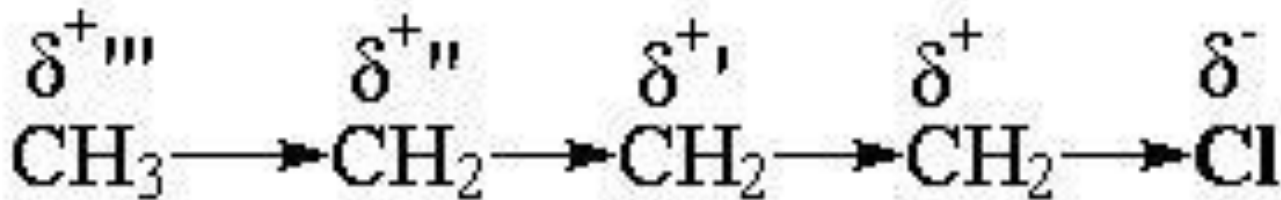


ЭЛЕКТРОННЫЕ ЭФФЕКТЫ

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

ИНДУКТИВНЫЙ ЭФФЕКТ

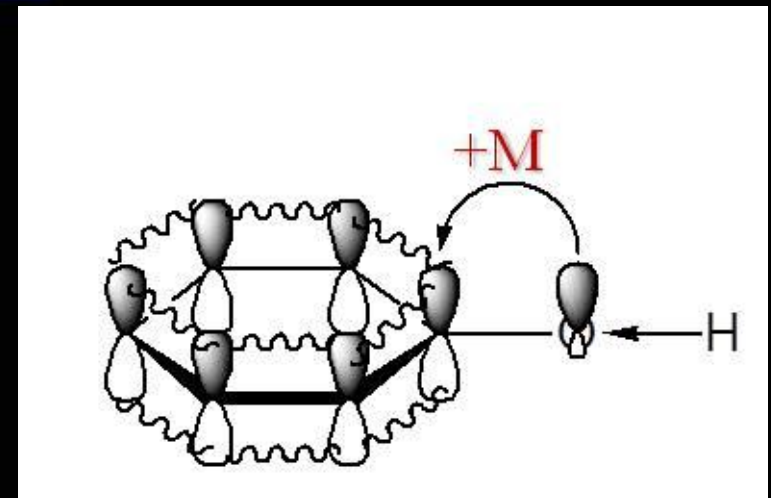
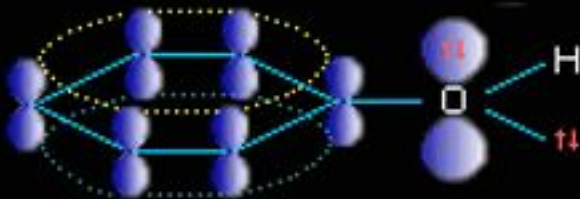
-эффект переноса электронной плотности вдоль сигма связей.



МЕЗОМЕРНЫЙ ЭФФЕКТ

-эффект переноса электронной плотности вдоль пи связей.

+M-эффект OH-группы в молекуле фенола



ОБЛАСТИ ПРИМЕНЕНИЯ



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



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



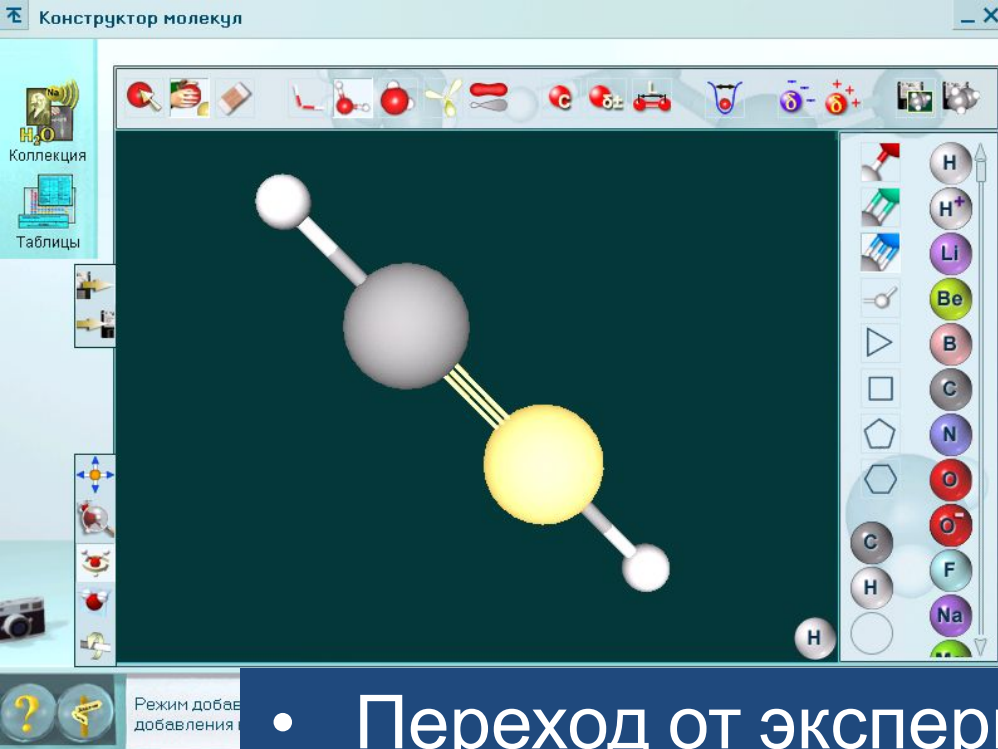


- Для расчета моделей биологических мембран, моделирования работы мышцы и т.д. в молекулярной биологии.



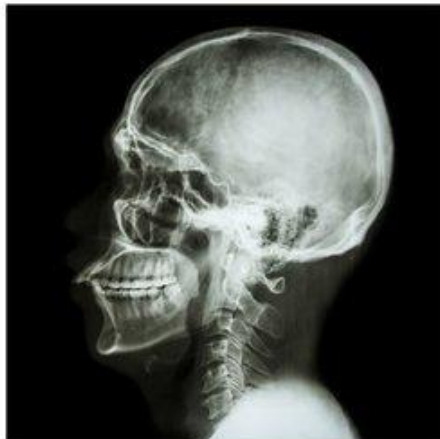
ПЕРСПЕКТИВЫ

- В медицине: возможность предсказать, как лекарства будут влиять на людей, основываясь на их генетике.



- Переход от экспериментов к компьютерному моделированию.





- В наномедицине: регенерация живых клеток, тканей и органов.

