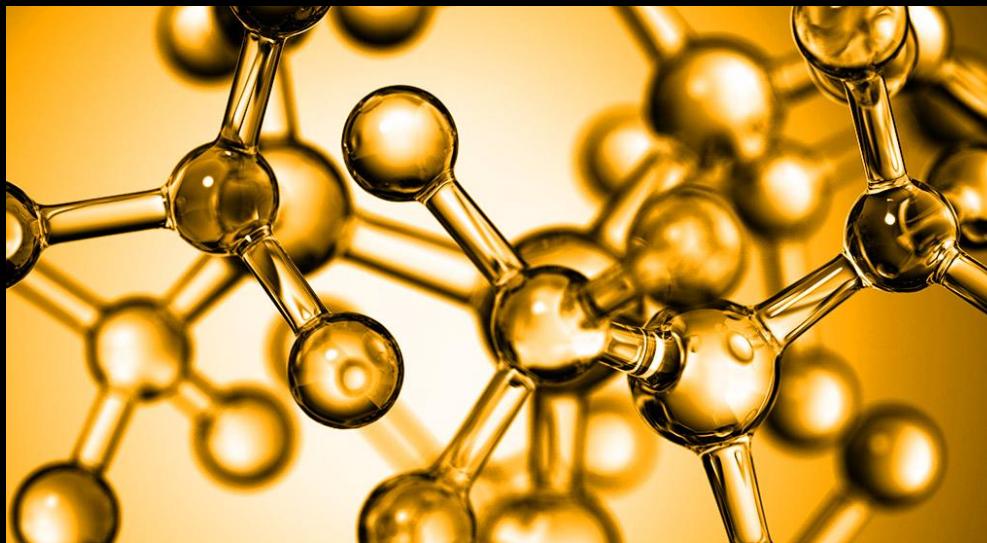
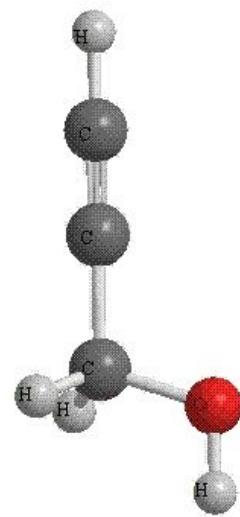
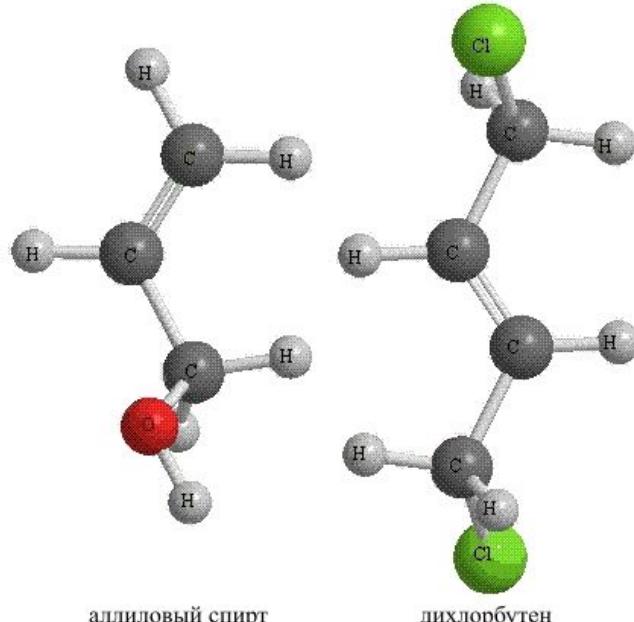


# КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

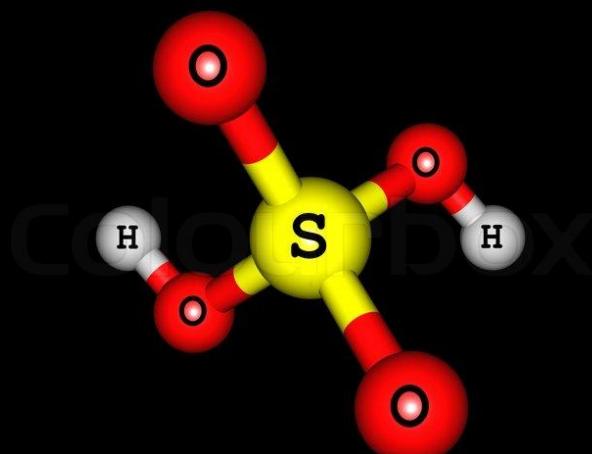


# ХИМИЯ

ОГРАНИЧЕСК  
АЯ



НЕОГРАНИЧЕСК  
АЯ





# ХИМИЯ

ФИЗИЧЕСКАЯ

АНАЛИТИЧЕСКАЯ

ХИМИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА

ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА

ЭЛЕКТРОХИМИЯ

КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

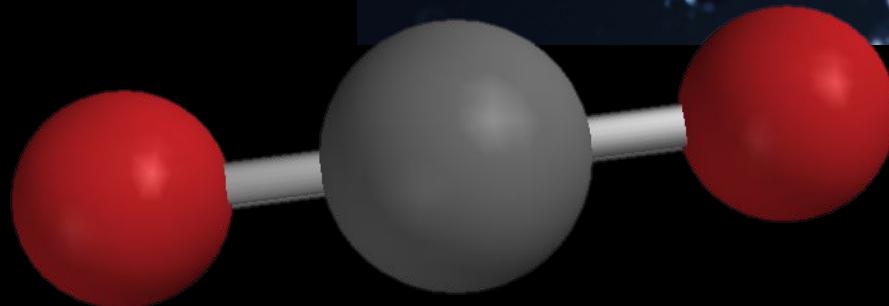
# ИСТОРИЯ

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



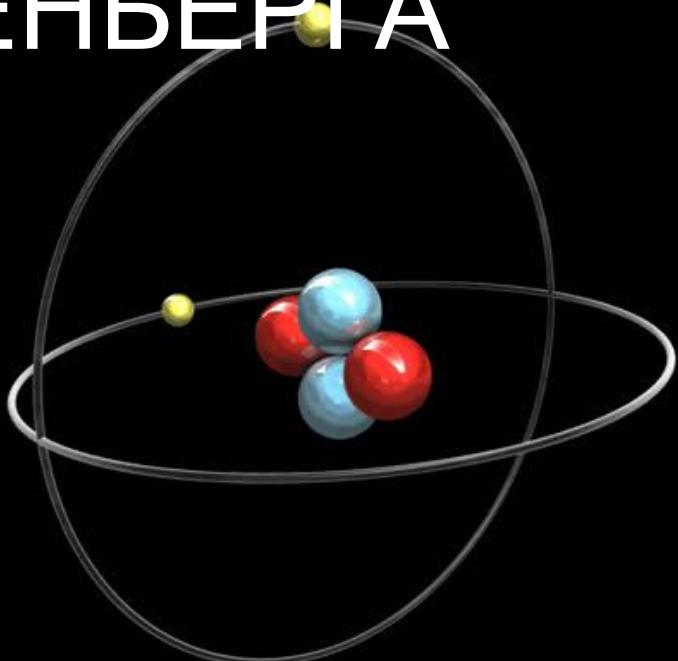
# ПРИЧИНЫ ВОЗНИКНОВЕНИЯ

Экспериментальный материал  
нуждался  
в интерпретации



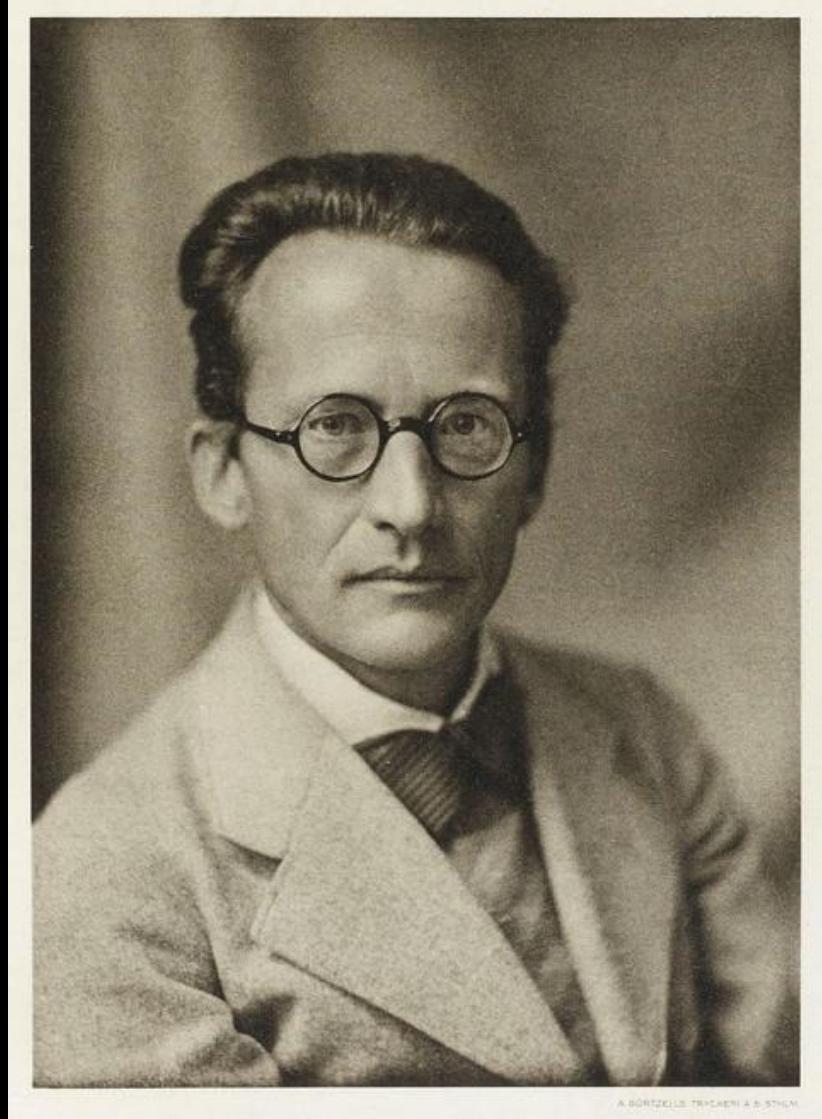
# ИССЛЕДОВАНИЯ ВЕРНЕРА ГЕЙЗЕНБЕРГА

1926 г.



# УРАВНЕНИЕ ШРЁДИНГЕР

А  
Уравнение  
описывает  
изменение  
в пространстве  
и во времени  
чистого состояния.



A. BÖRTZELLS TRICHTER A. S. STIER

## 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  $\Psi$  характеризует амплитуду электронной волны, а её квадрат  $\Psi^2$  – плотность вероятности нахождения электрона в определённой области пространства.

# ГИПОТЕЗА ДЕ БРОЙЛЯ

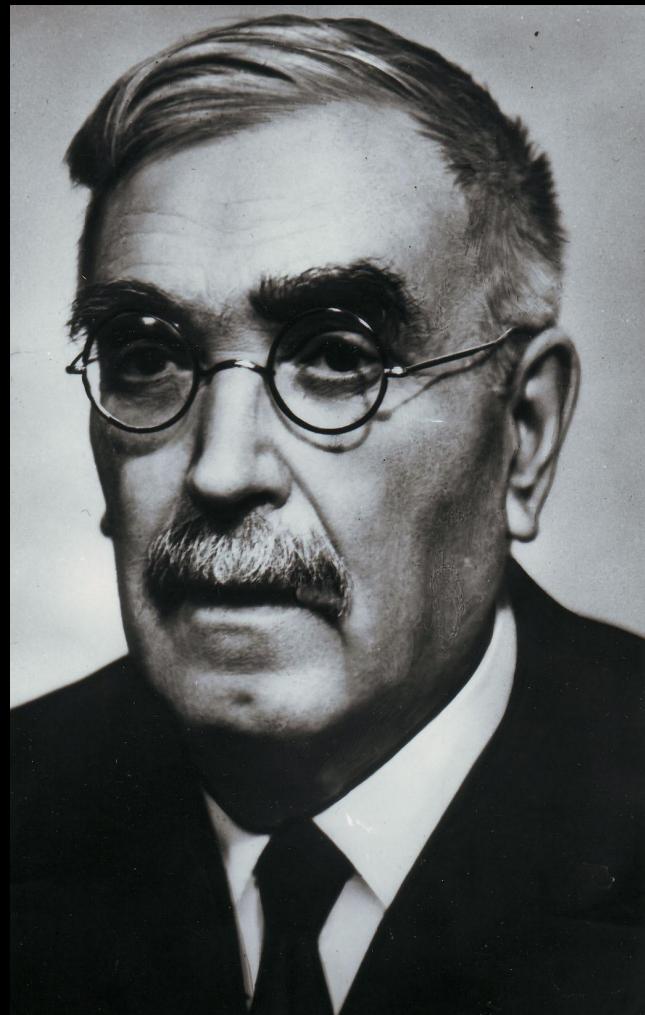
Дуализм не является особенностью только оптических явлений, а имеет универсальный характер. Частицы вещества также обладают волновыми свойствами



# МЕТОД ХАРТРИ-ФОКА

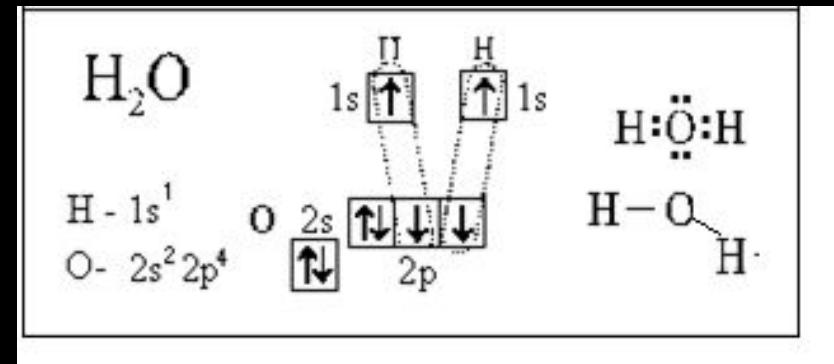
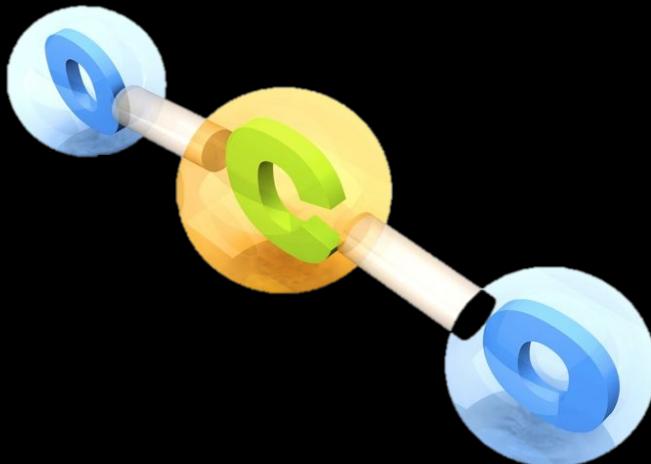
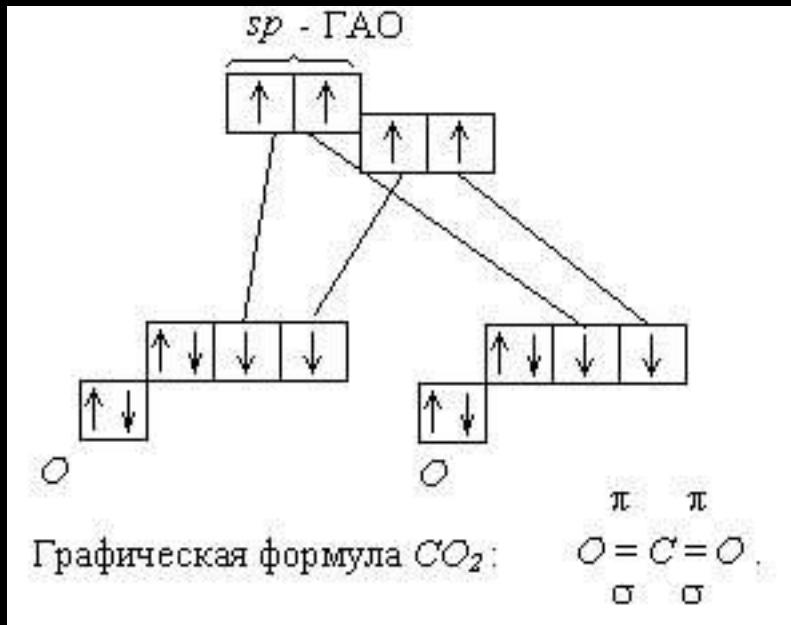


Дуглас Рейнер Хартри



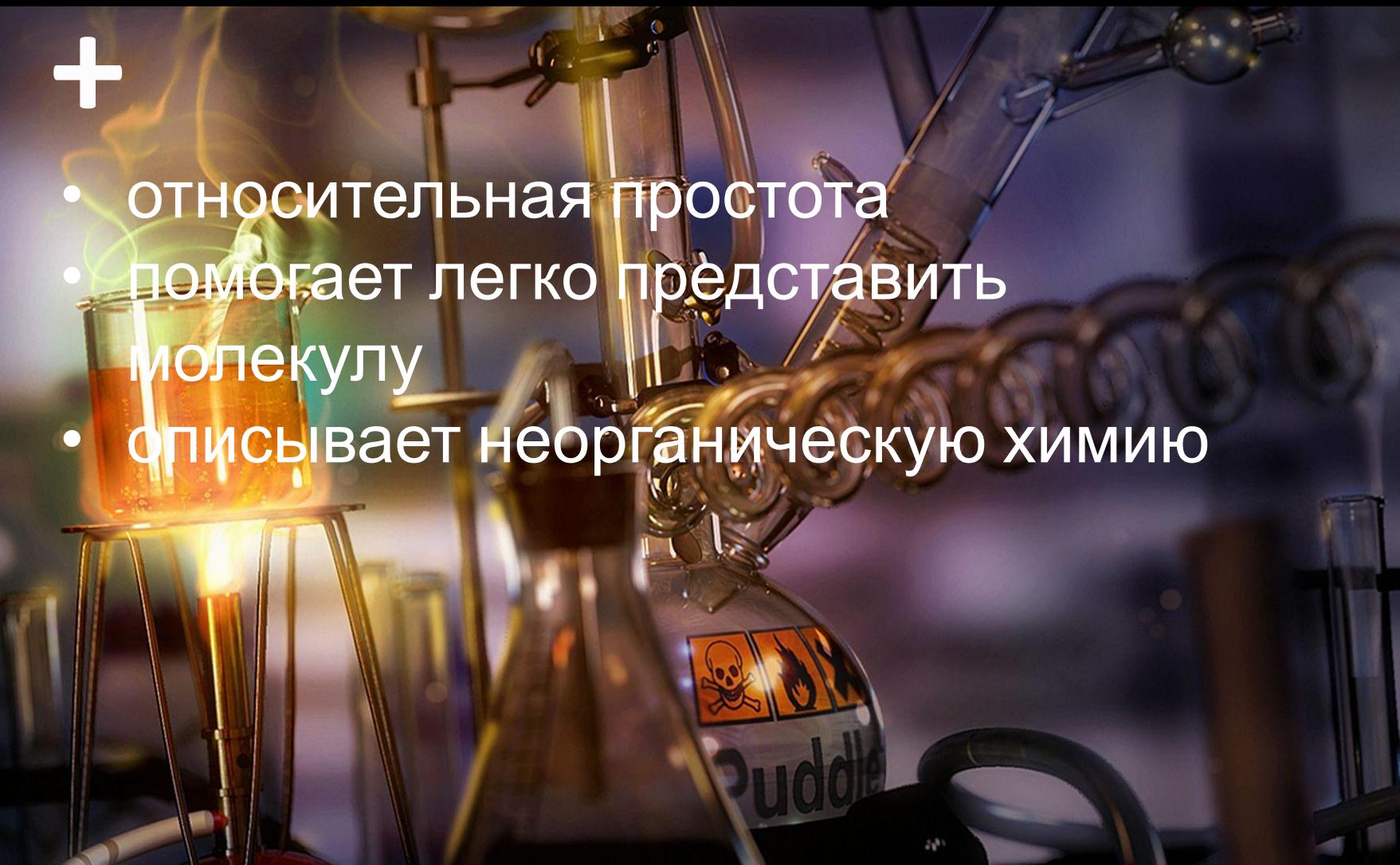
Владимир Александрович  
Фок

# ТЕОРИЯ ВАЛЕНТНЫХ СВЯЗЕЙ



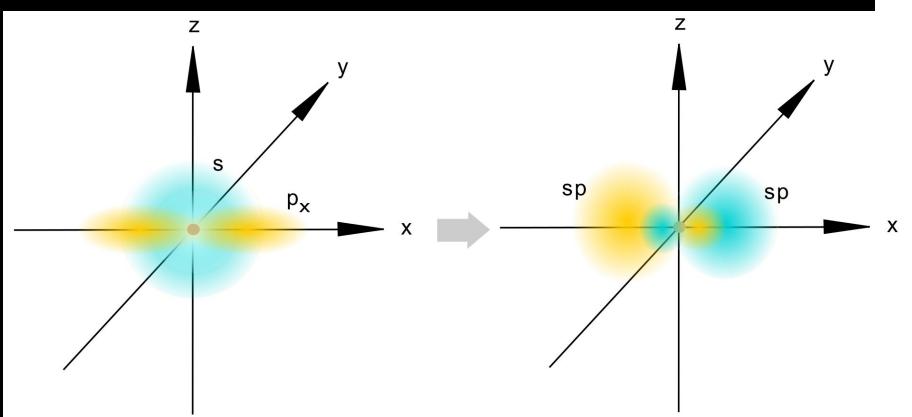
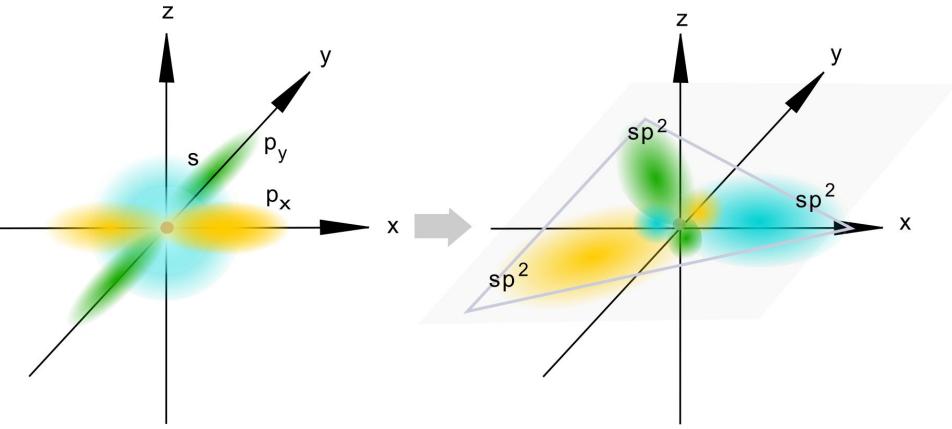
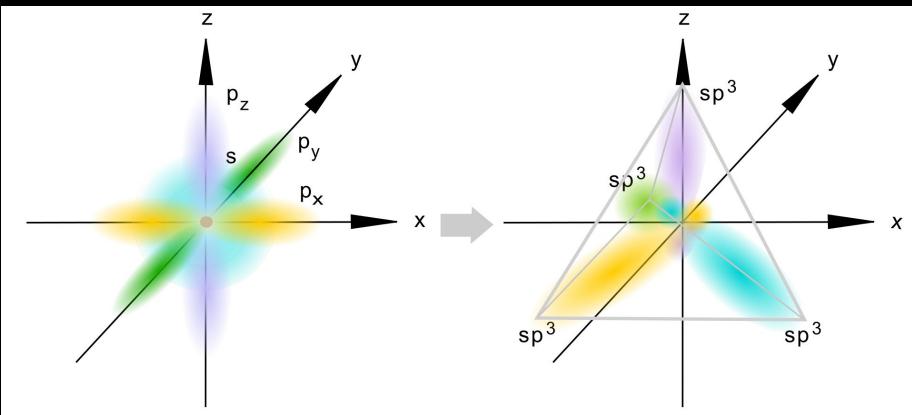


- относительная простота
- помогает легко представить молекулу
- описывает неорганическую химию



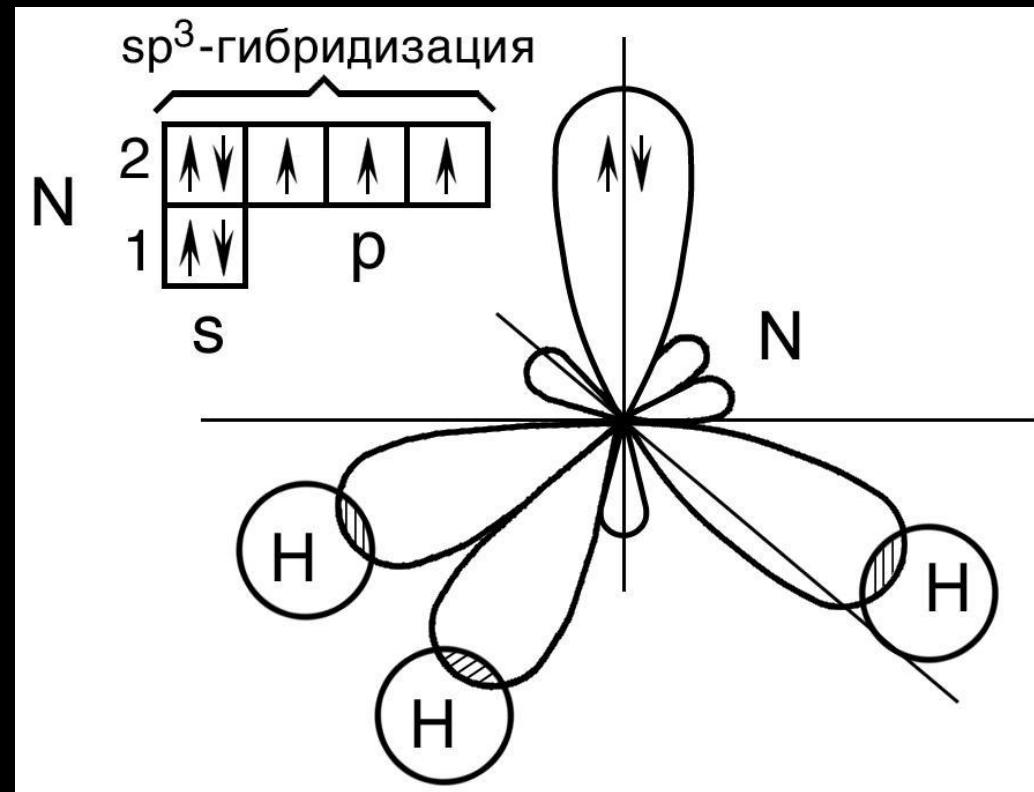
- даёт правильное описание в малой области химических соединений
- малая предсказательная способность
- не даёт магнитных свойств веществ и их геометрию

# ГИБРИДИЗАЦИЯ



# ТЕОРИЯ ГИЛЛЕСПИ

- NH<sub>3</sub>-sp<sup>2</sup> гибридизация?

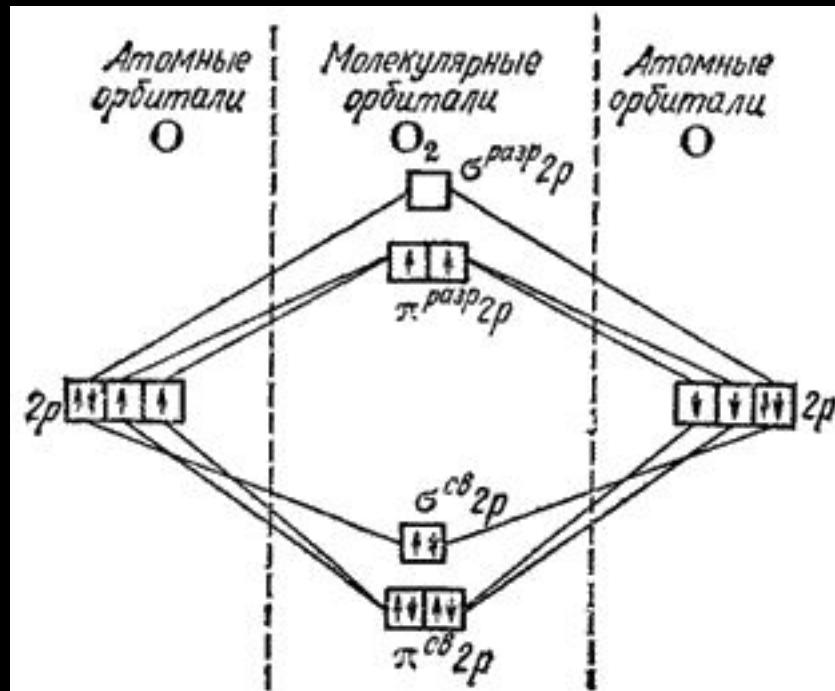


# МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНЫХ ОРБИТАЛЕЙ

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.

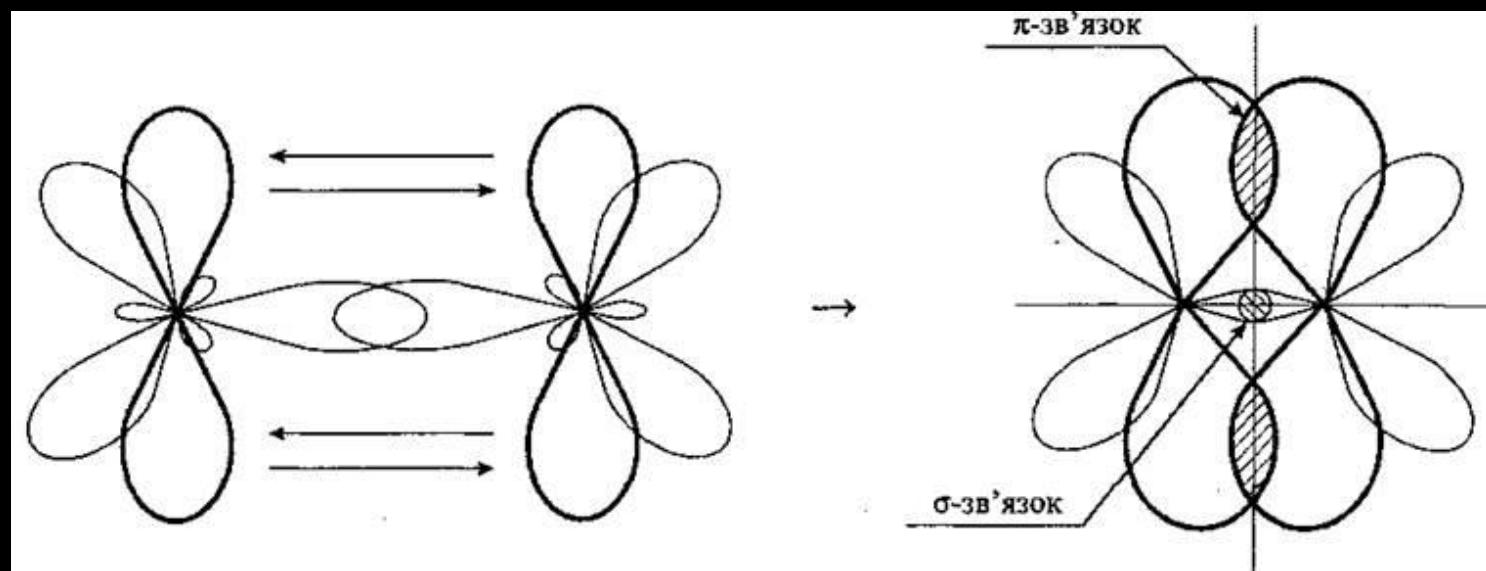
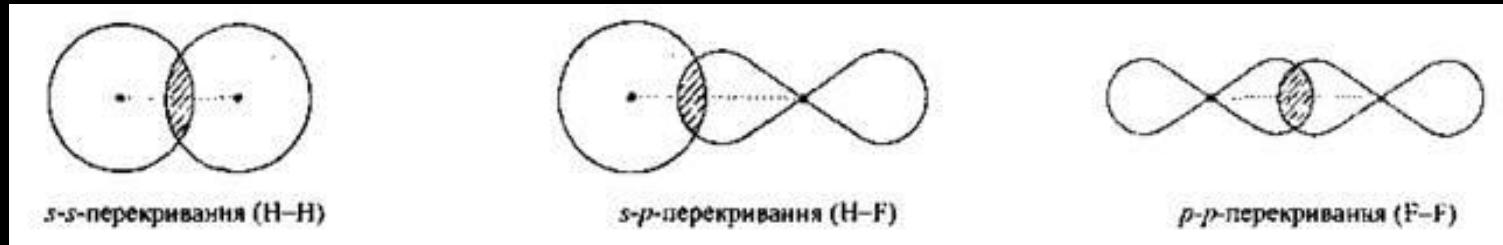




- даёт геометрию молекулы
- объективнее отражает реальность
- имеет сильную предсказательную способность, даже без расчёта
- предсказывает магнитные свойства молекул
- относительная простота математики

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



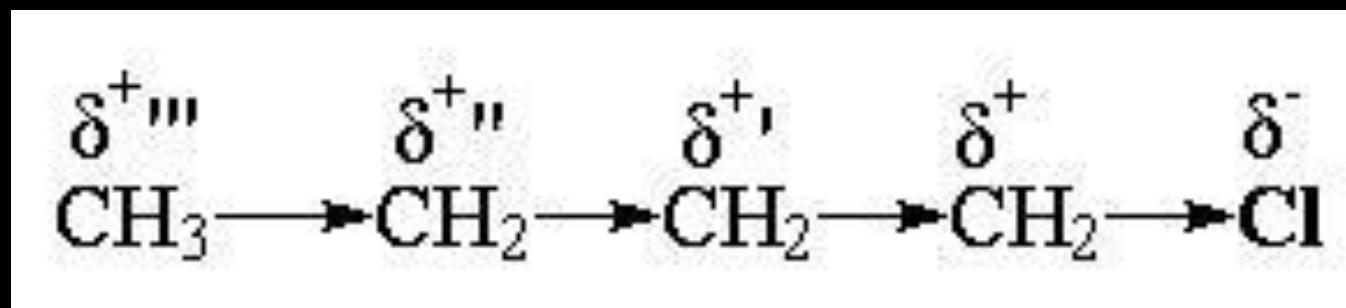


# ЭЛЕКТРОННЫЕ ЭФФЕКТЫ

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

# ИНДУКТИВНЫЙ ЭФФЕКТ

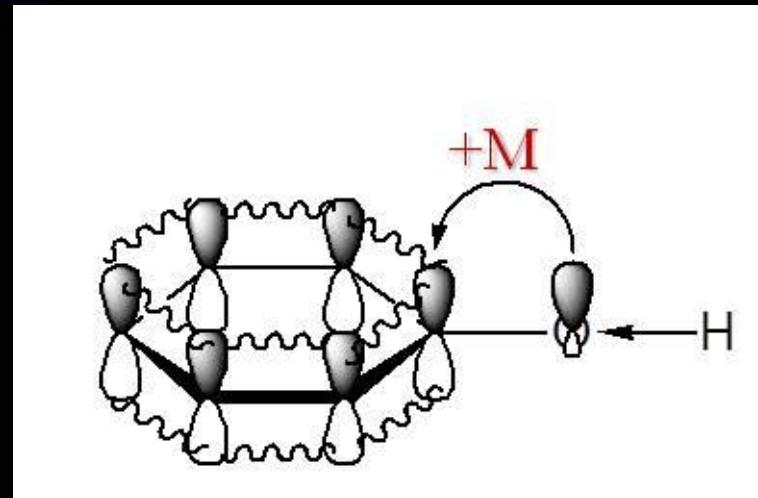
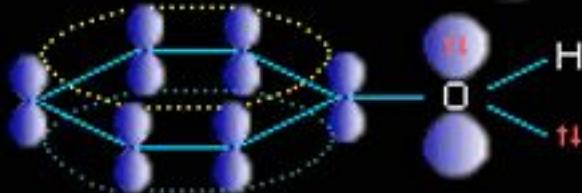
-эффект переноса электронной плотности вдоль сигма связей.



# МЕЗОМЕРНЫЙ ЭФФЕКТ

-эффект переноса электронной плотности вдоль π-связей.

+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.



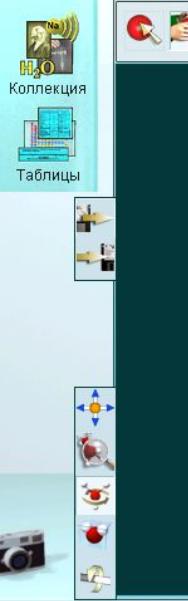


- Для расчета моделей биологических мембран, моделирования работы мышцы и т.д. в молекулярной биологии.



# 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.

