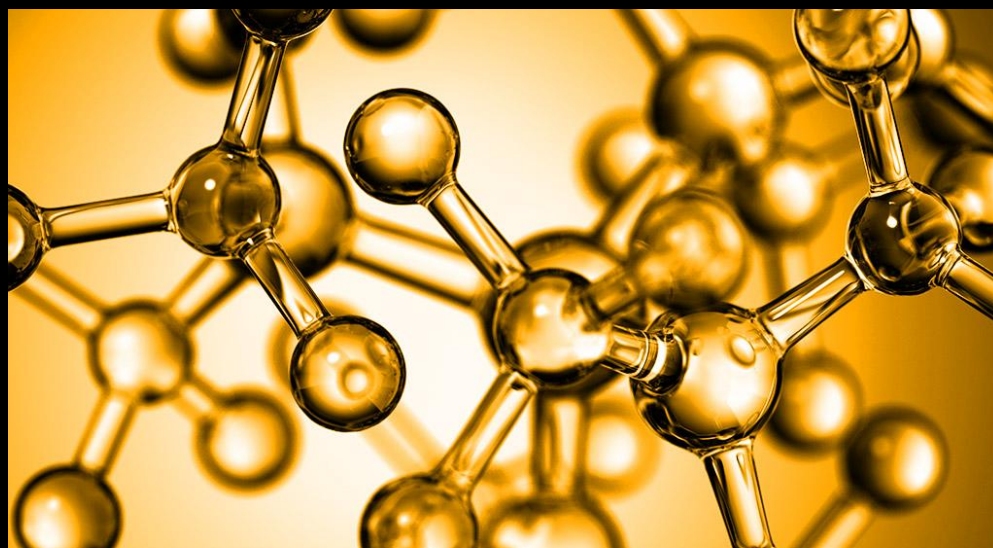


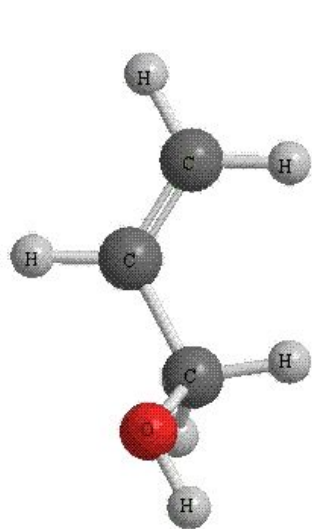
# КВАНТОВАЯ ХИМИЯ



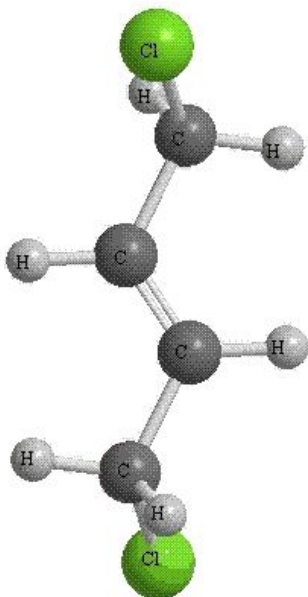
# ХИМИЯ

ОРГАНИЧЕСКАЯ

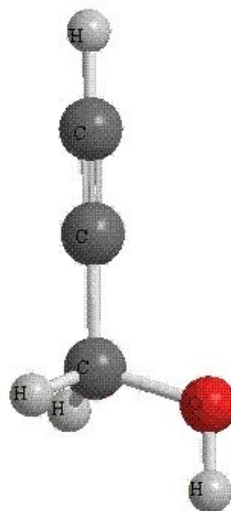
НЕОРГАНИЧЕСКАЯ



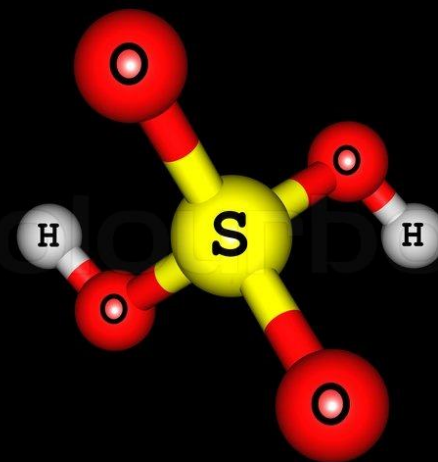
аллиловый спирт



дихлорбутен



пропаргиловый спирт



ХИМИЯ

ФИЗИЧЕСКАЯ

АНАЛИТИЧЕСКАЯ

ХИМИЧЕСКАЯ  
КИНЕТИКА

ХИМИЧЕСКАЯ  
ТЕРМОДИНАМИКА

ЭЛЕКТРОХИМИЯ

КВАНТОВАЯ  
ХИМИЯ



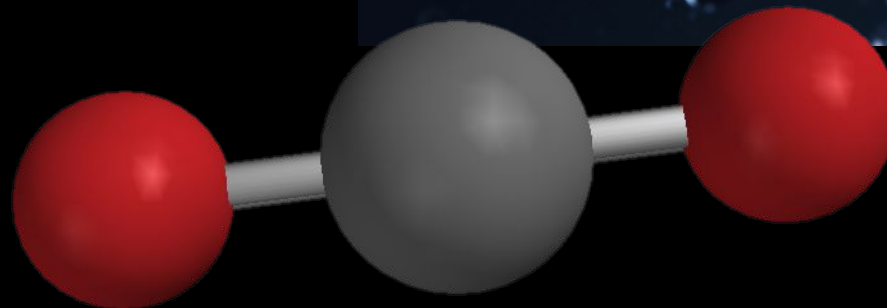
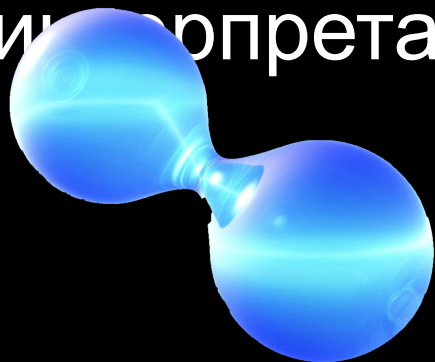
# ИСТОРИЯ

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



# ПРИЧИНЫ ВОЗНИКНОВЕНИЯ

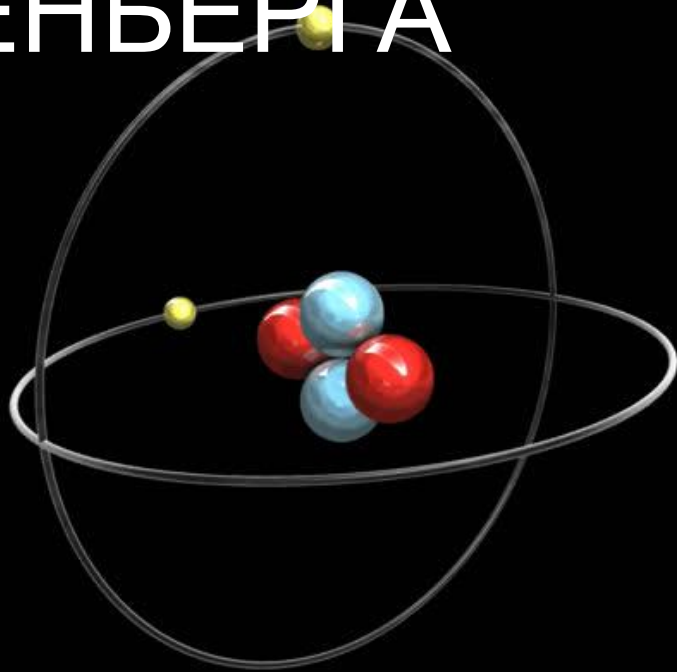
Экспериментальный материал  
нуждался  
в интерпретации





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



# ГИПОТЕЗА ДЕ БРОЙЛЯ

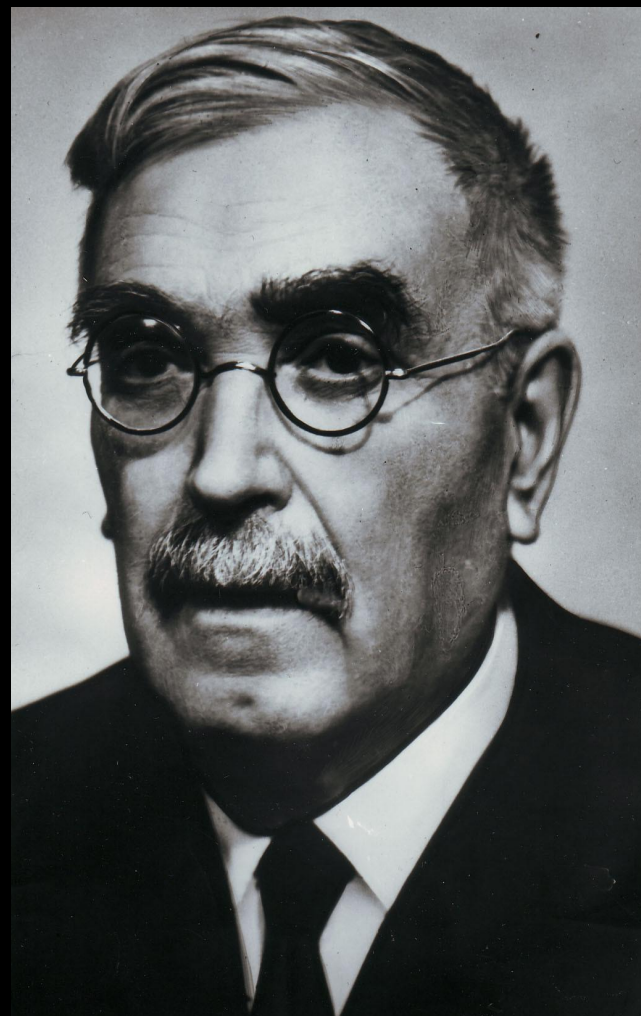
Дуализм не является особенностью только оптических явлений, а имеет универсальный характер. Частицы вещества также обладают волновыми свойствами



# МЕТОД ХАРТРИ-ФОКА

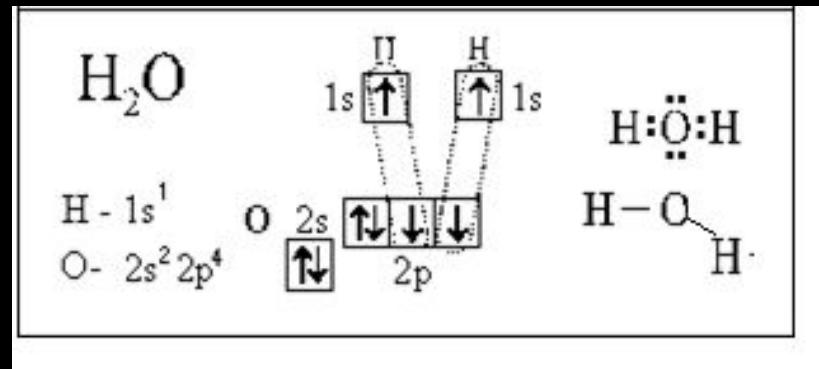
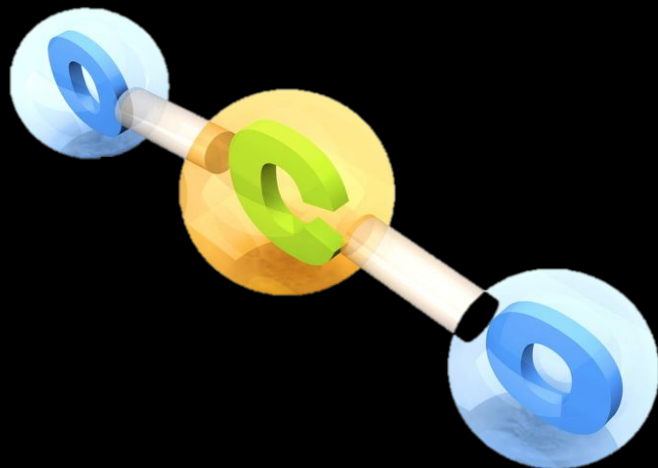
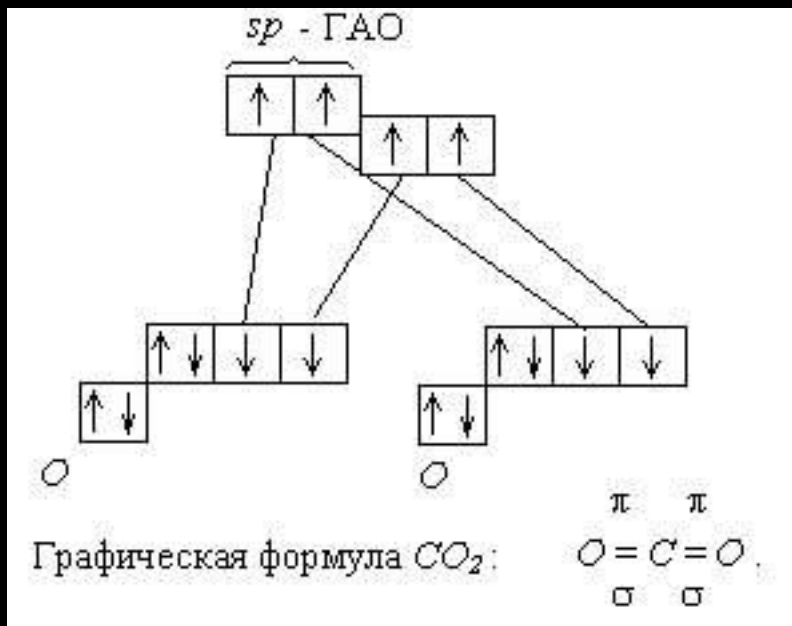


Дуглас Рейнер Хартри



Владимир Александрович  
Фок

# ТЕОРИЯ ВАЛЕНТНЫХ СВЯЗЕЙ



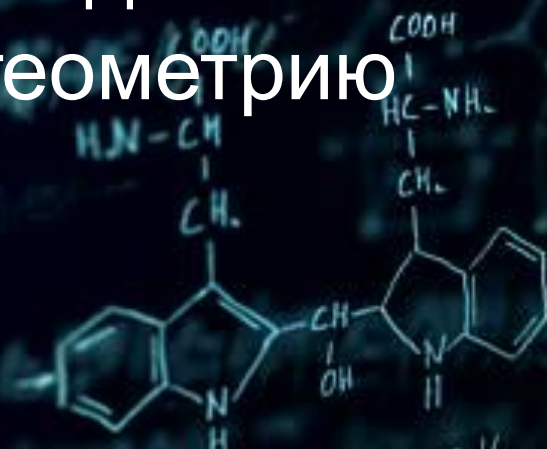




+

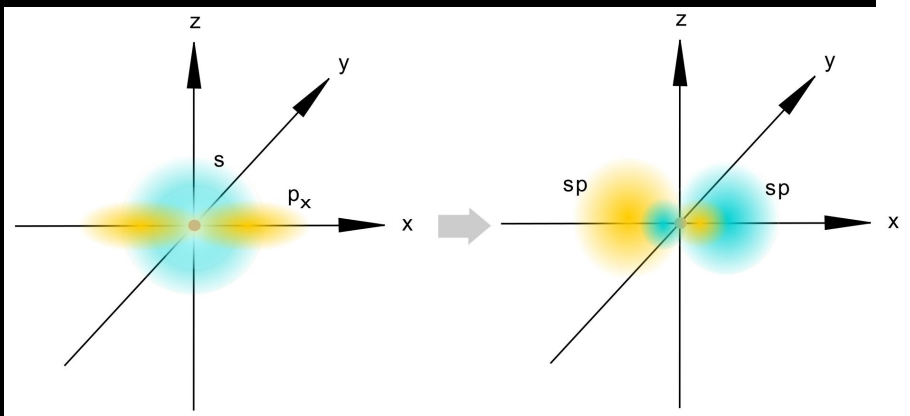
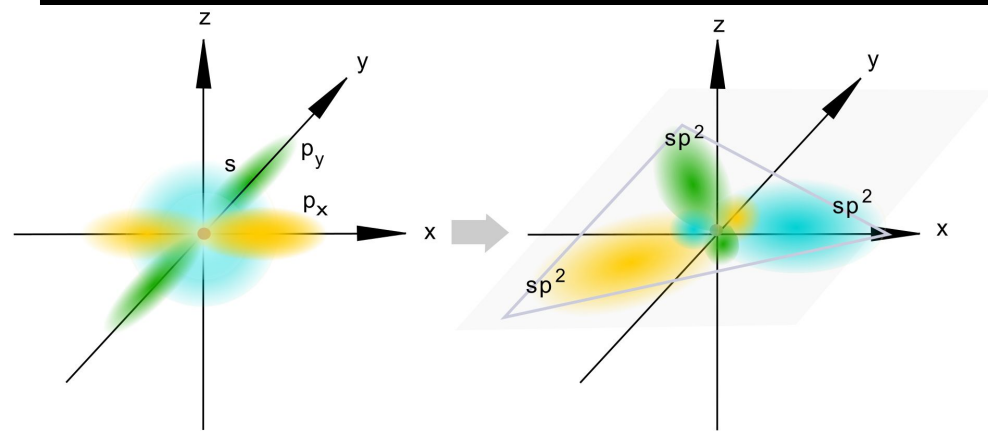
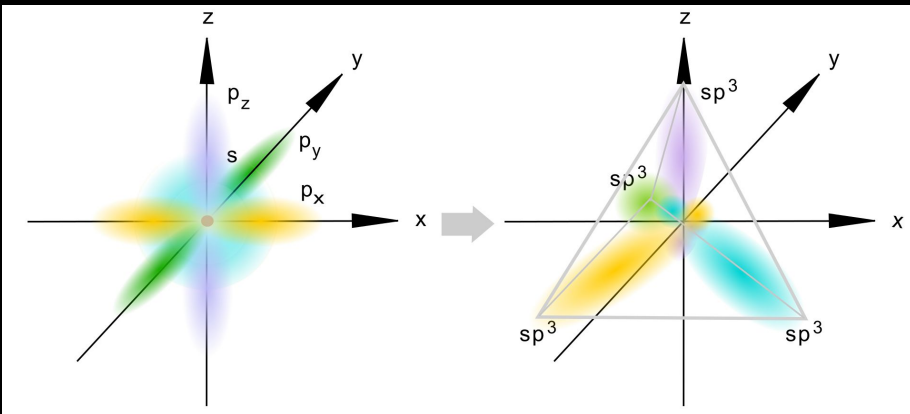
- относительная простота
- помогает легко представить молекулу
- описывает неорганическую химию

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



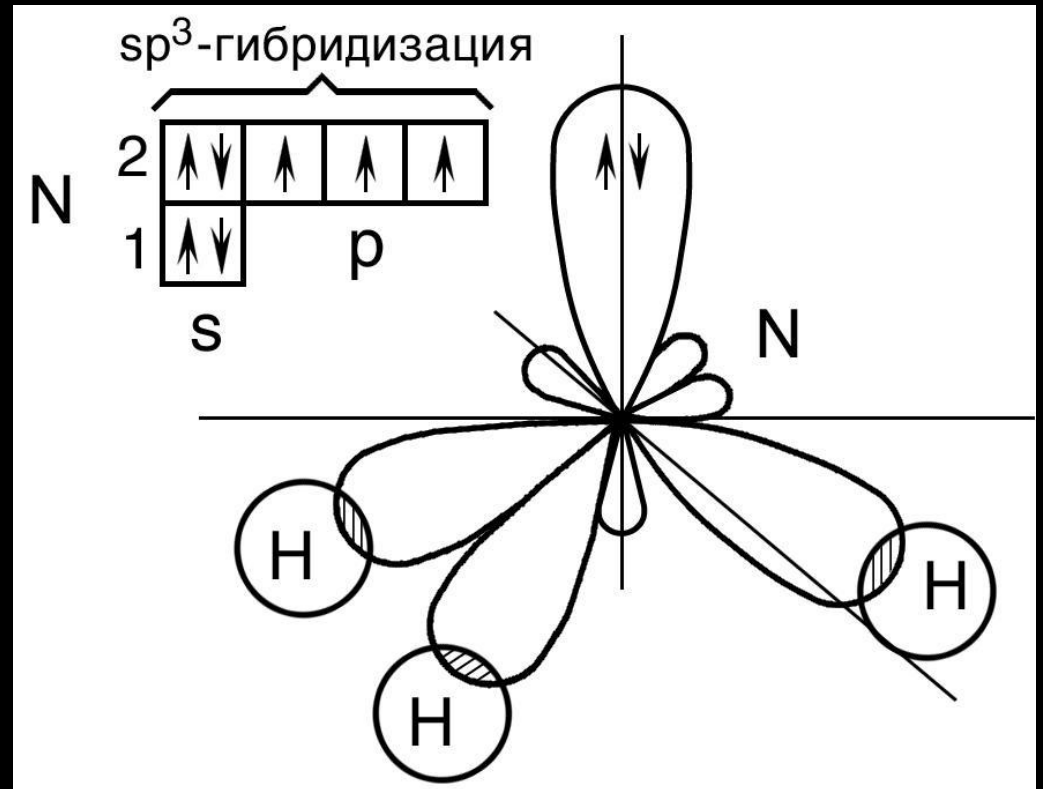


# ГИБРИДИЗАЦИЯ



# ТЕОРИЯ ГИЛЛЕСПИ

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

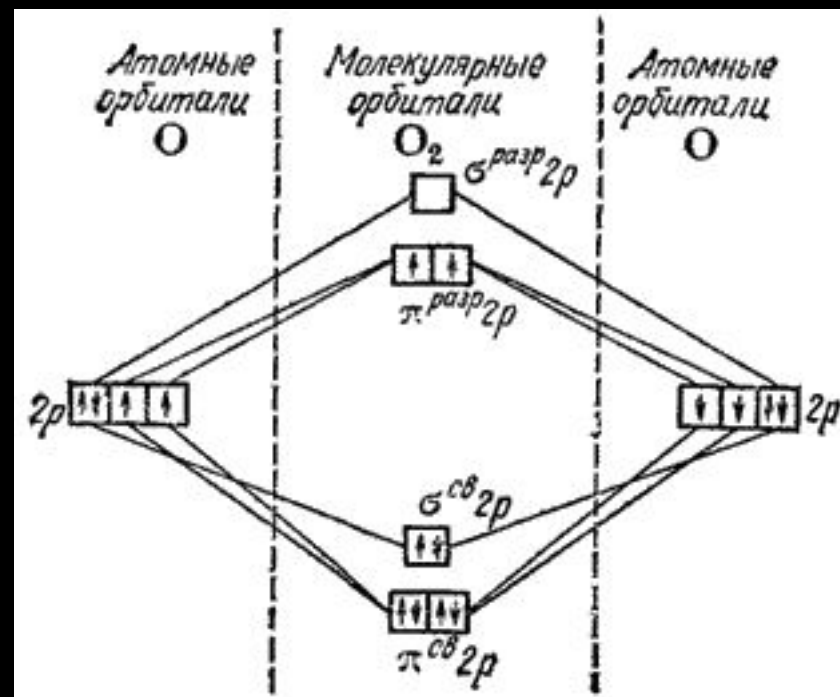


# МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНЫХ ОРБИТАЛЕЙ

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.



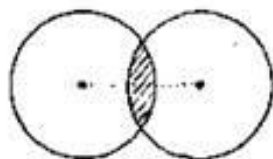
+

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

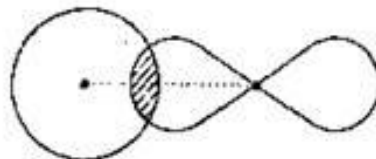


- сложность подбора коэффициента для атомной орбитали
- рост сложности расчёта молекул с ростом количества атомов

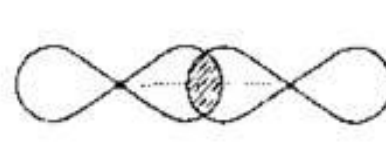




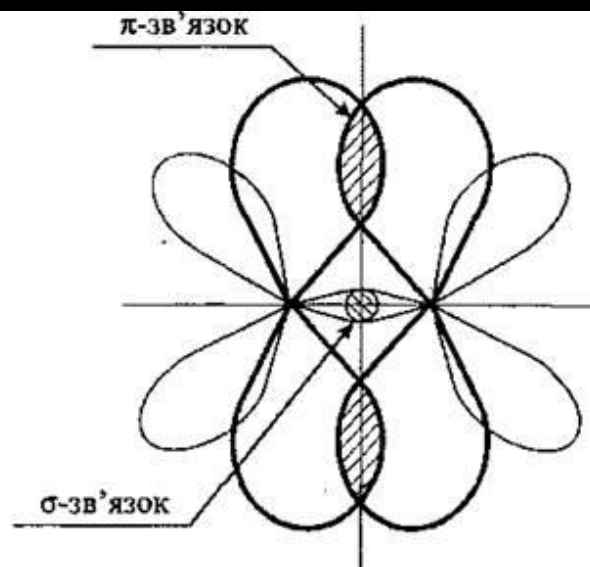
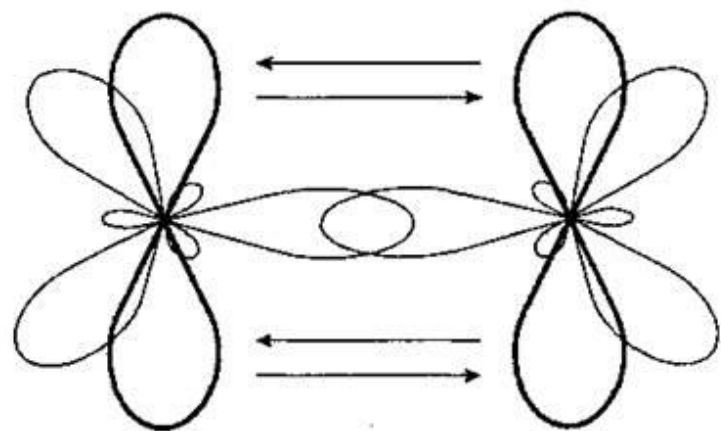
*s-s*-перекривання (H–H)



*s-p*-перекривання (H–F)



*p-p*-перекривання (F–F)

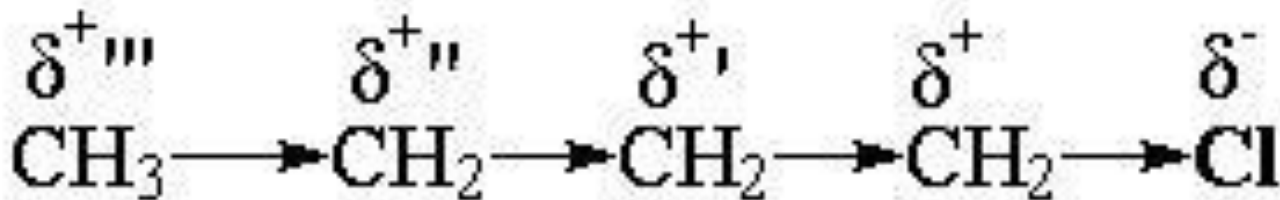


# ЭЛЕКТРОННЫЕ ЭФФЕКТЫ

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

# ИНДУКТИВНЫЙ ЭФФЕКТ

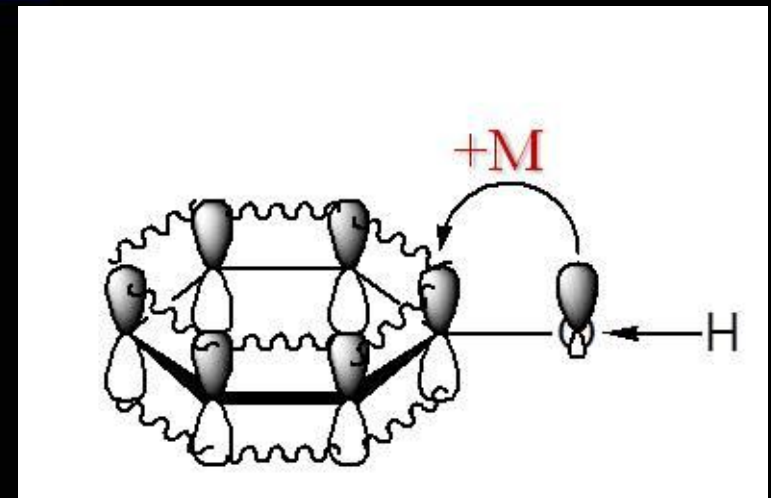
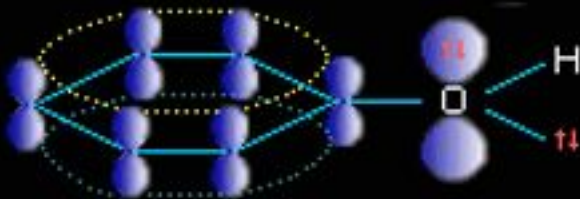
-эффект переноса электронной плотности вдоль сигма связей.



# 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.





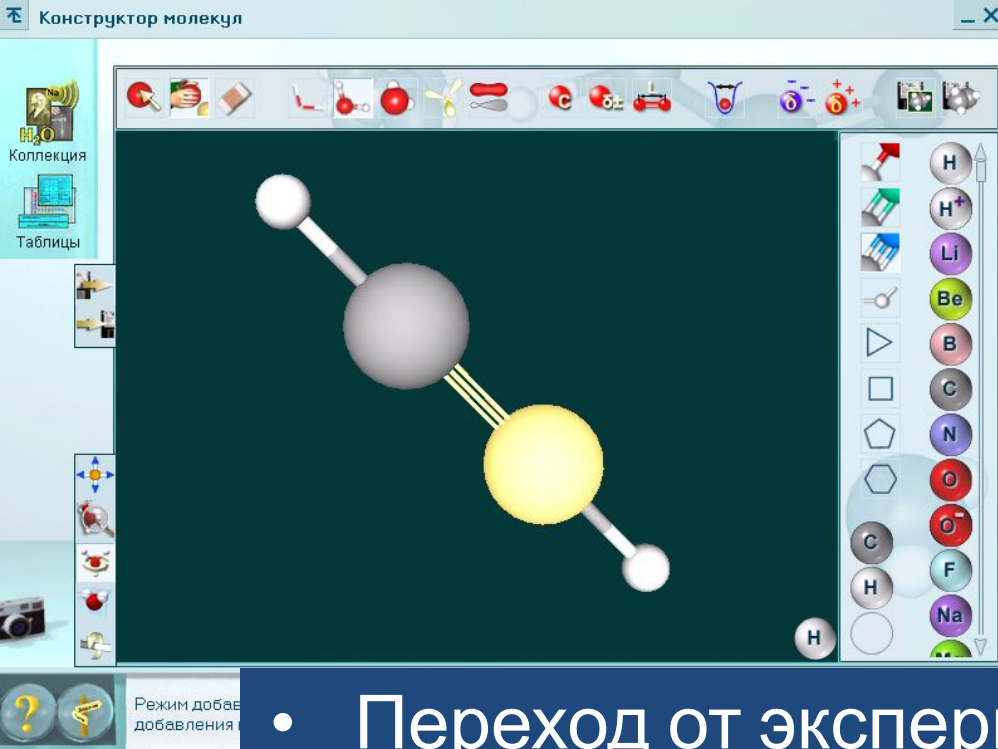
- Для расчета моделей биологических мембран, моделирования работы мышцы и т.д. в молекулярной биологии.





# ПЕРСПЕКТИВЫ

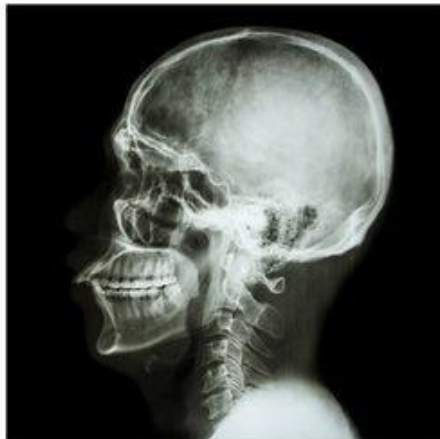
- В медицине: возможность предсказать, как лекарства будут влиять на людей, основываясь на их генетике.



- Переход от экспериментов к компьютерному моделированию.







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

