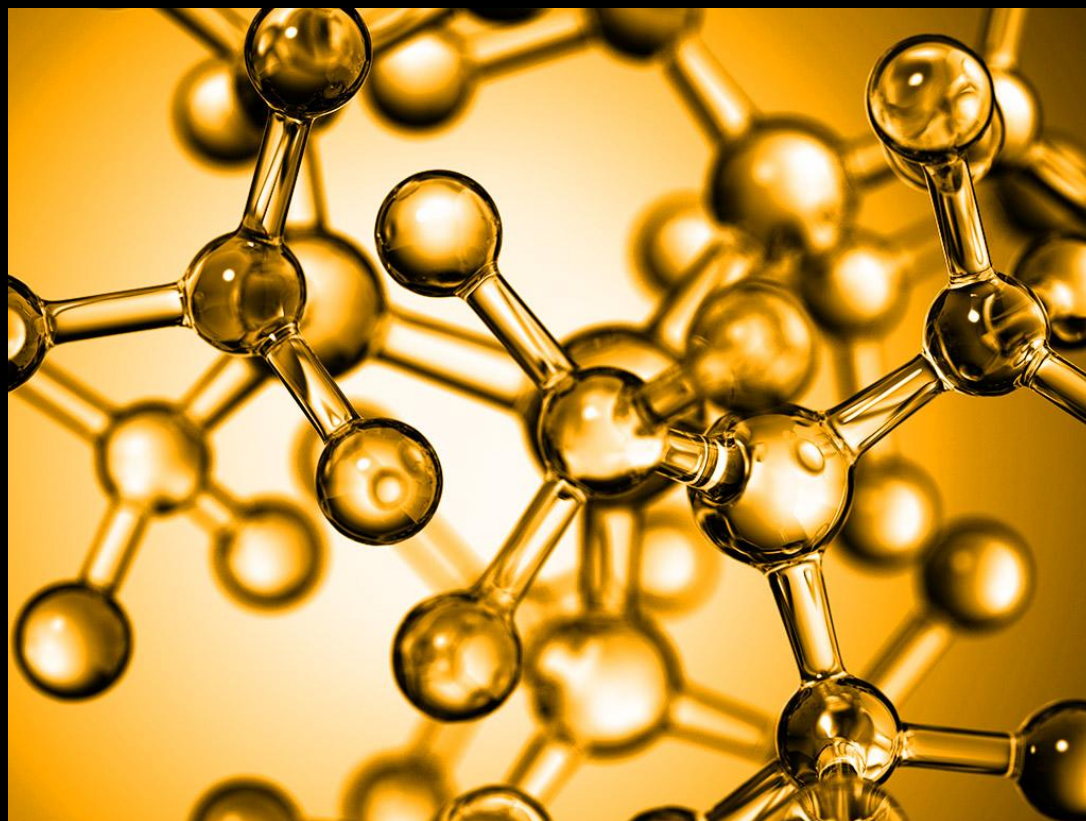


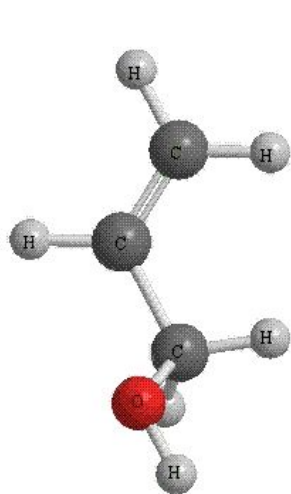
КВАНТОВАЯ ХИМИЯ



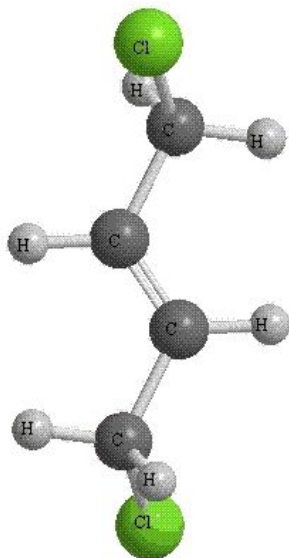
ХИМИЯ

ОРГАНИЧЕСКАЯ

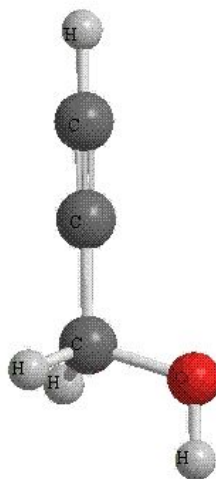
НЕОРГАНИЧЕСКАЯ



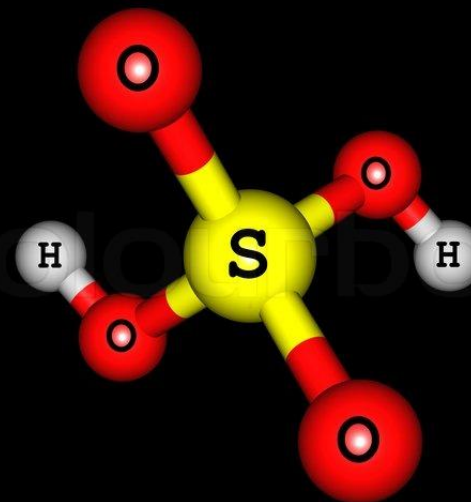
аллиловый спирт



дихлорбутен



пропаргиловый спирт

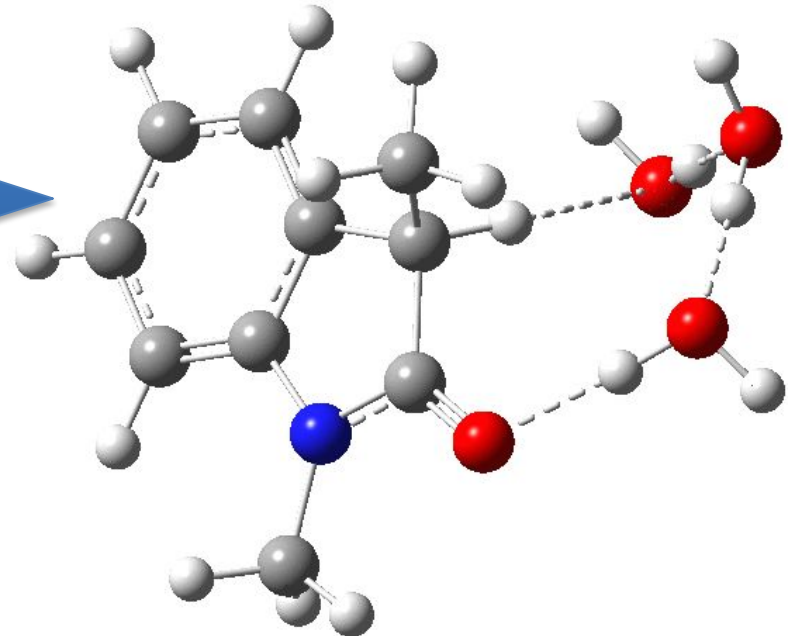


ХИМИЯ

ФИЗИЧЕСКАЯ

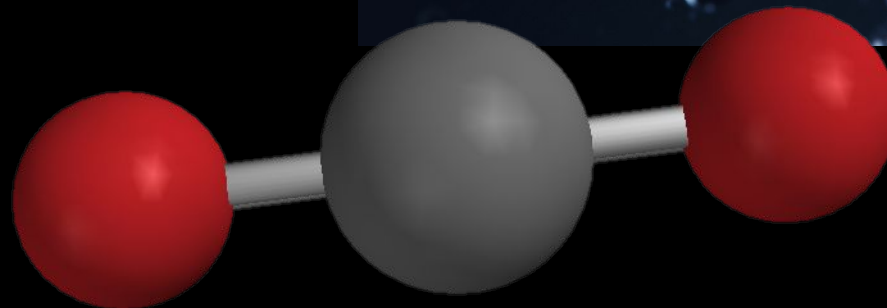
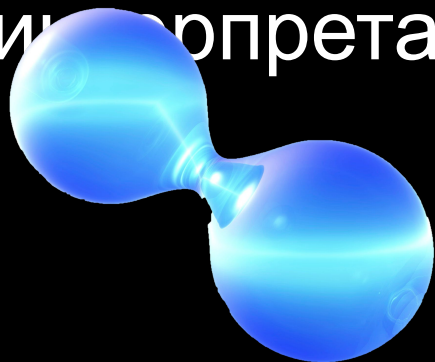
АНАЛИТИЧЕСКАЯ

КВАНТОВАЯ
ХИМИЯ



ПРИЧИНЫ ВОЗНИКНОВЕНИЯ

Экспериментальный материал
нуждался
в интерпретации

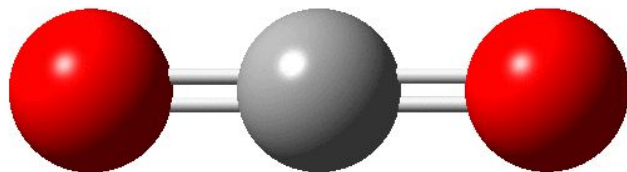
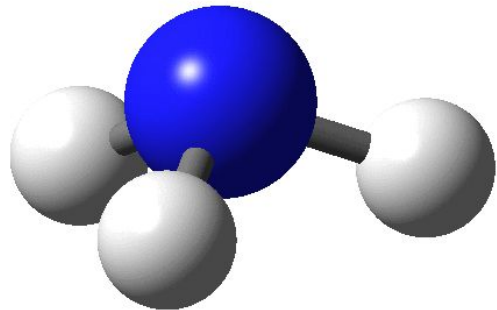


ИСТОРИЯ

Зародилась в середине 20-х годов 20 столетия.



УРАВНЕНИЕ ШРЁДЕНГЕРА



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.

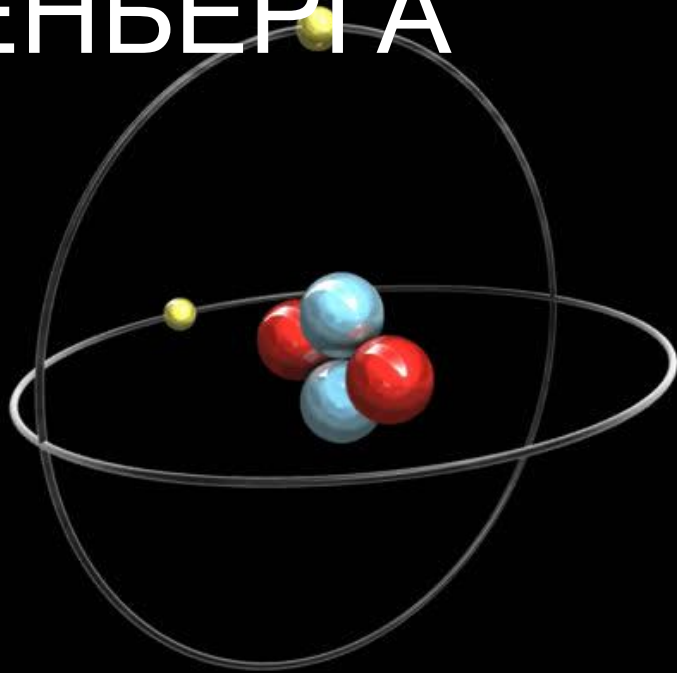
The screenshot displays a molecular modeling software interface. The central workspace shows a ball-and-stick model of a branched alkene molecule with the structure CC(C)C=C. The molecule consists of four carbon atoms and eight hydrogen atoms. The carbon atoms are represented by grey spheres, and hydrogen atoms by white spheres. A double bond is shown between the two terminal carbon atoms on the right. The interface includes a top toolbar with various tools for editing and viewing the model, such as a mouse cursor, a hand, a box select, a lasso select, a delete tool, a bond tool, a bond type selector (single, double, triple), a bond angle tool, a bond length tool, a bond order tool, a bond type tool, a bond color tool, a bond style tool, a bond width tool, a bond thickness tool, a bond color tool, a bond style tool, a bond width tool, a bond thickness tool, a bond color tool, a bond style tool, a bond width tool, a bond thickness tool.

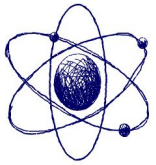
On the left side, there are icons for a collection of molecules (Коллекция) and tables (Таблицы). On the right side, there is a vertical toolbar with various shapes and a list of atoms: H, H⁺, Li, Be, B, C, N, O, O⁻, F, Na. The bottom right corner features a question mark icon and a 'Журнал' (Journal) icon.

Режим добавления атомов. Выберите новый атом из предложенного списка. Для добавления нажмите мышкой на атом к которому вы хотите добавить новый.

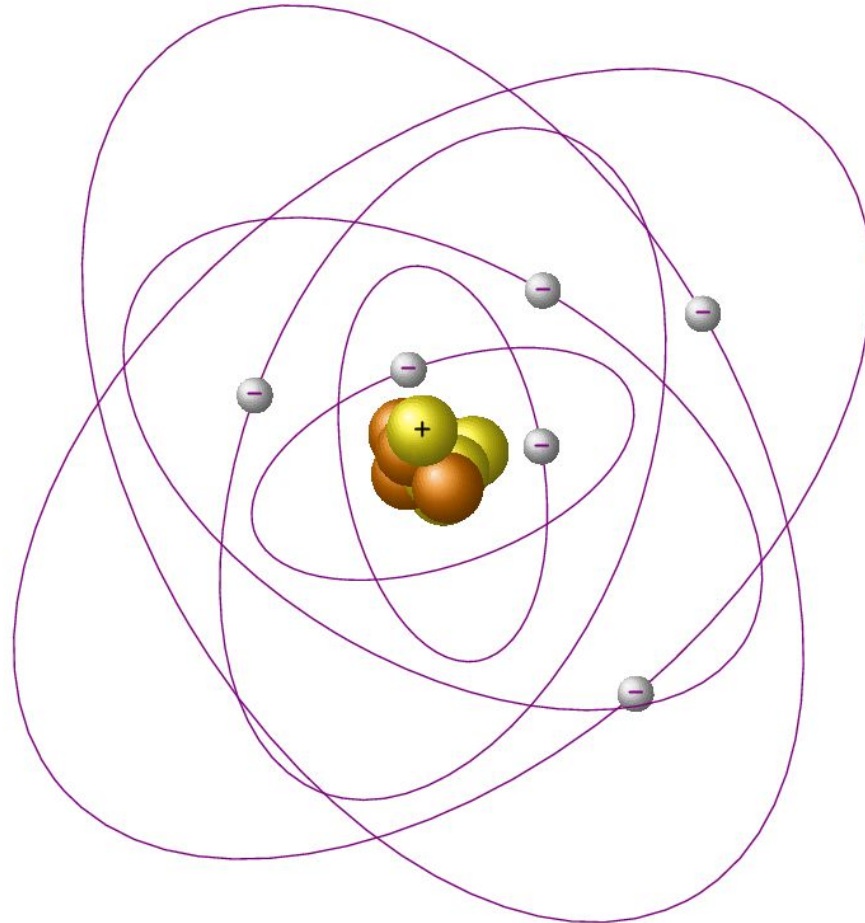
ИССЛЕДОВАНИЯ ВЕРНЕРА ГЕЙЗЕНБЕРГА

1926 г.

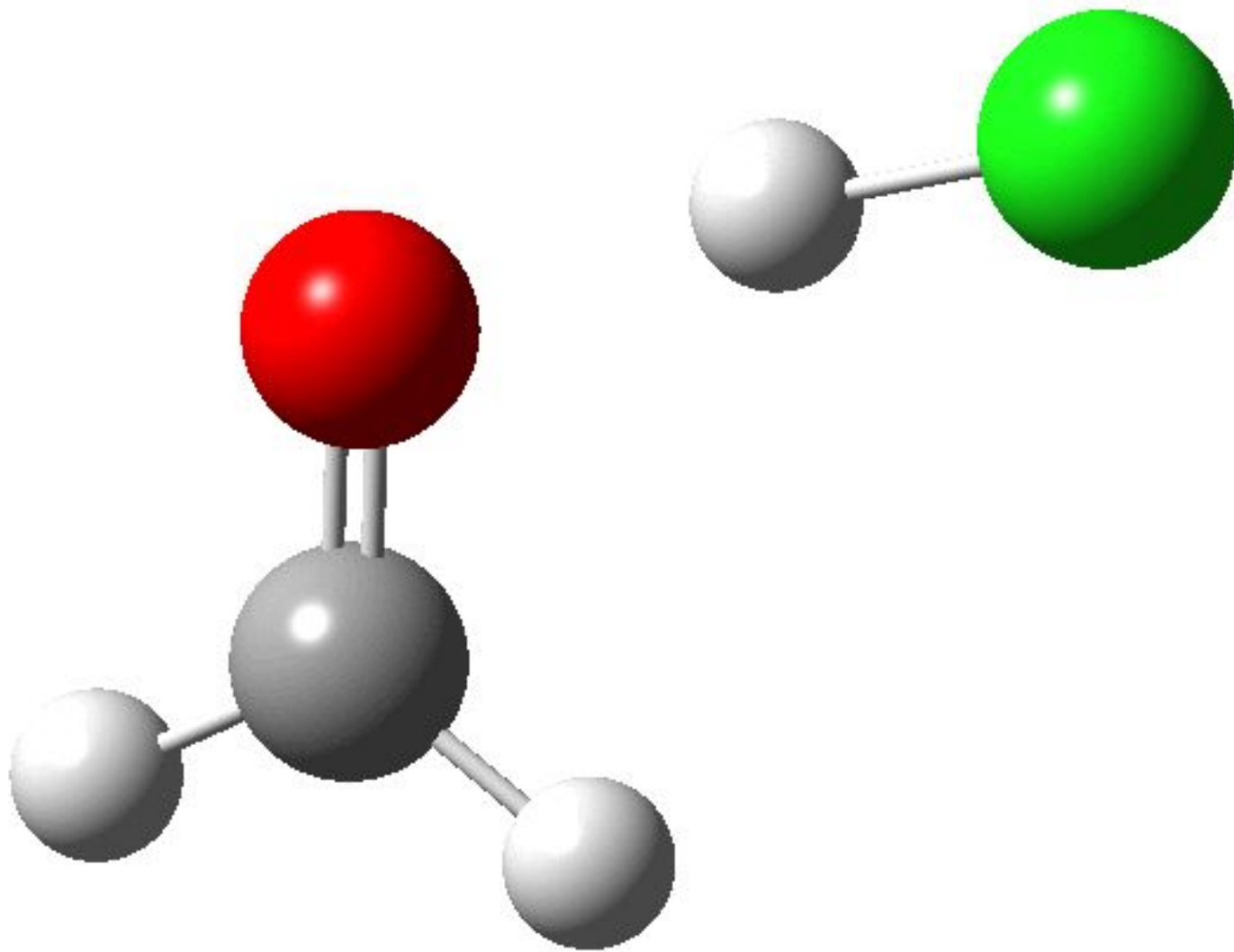




СТРОЕНИЕ АТОМА



СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛЫ.



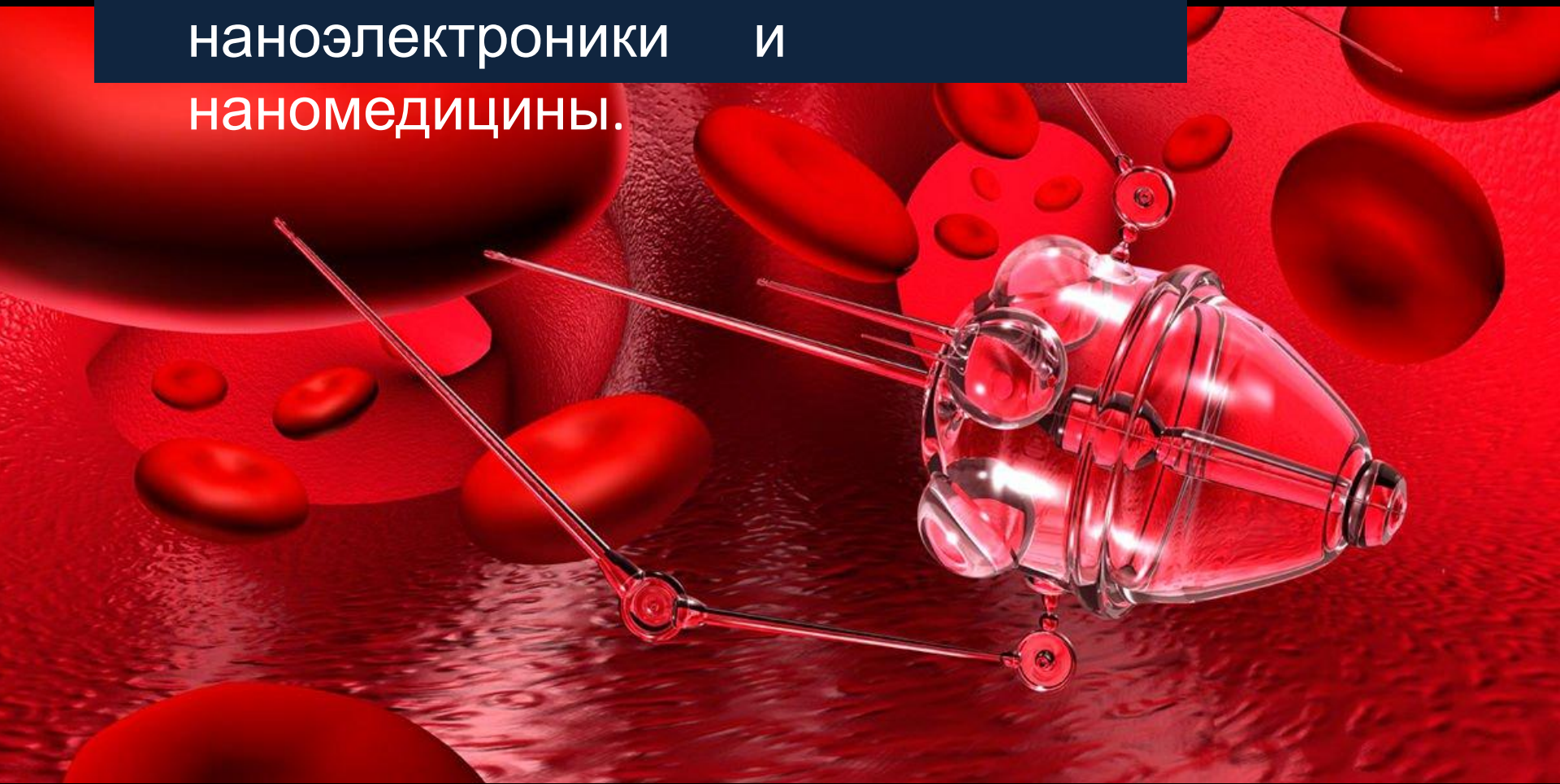
ОБЛАСТИ ПРИМЕНЕНИЯ



- 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.



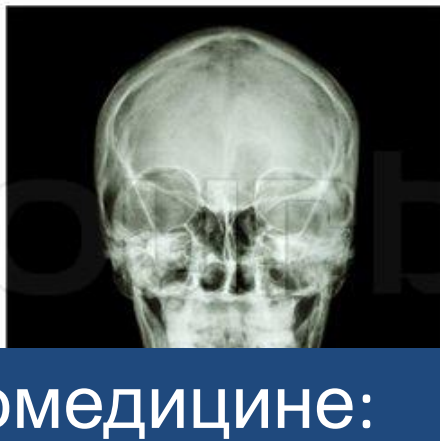
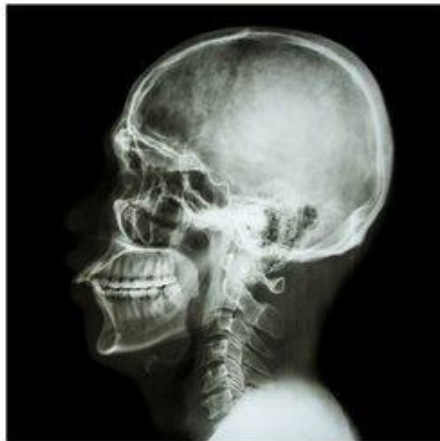
- Переход от экспериментов к компьютерному моделированию.

Конструктор молекул

Коллекция

Режим добавления атомов. Выберите новый атом из предложенного списка. Для добавления нажмите мышкой на атом к которому вы хотите добавить новый.

Журнал



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

