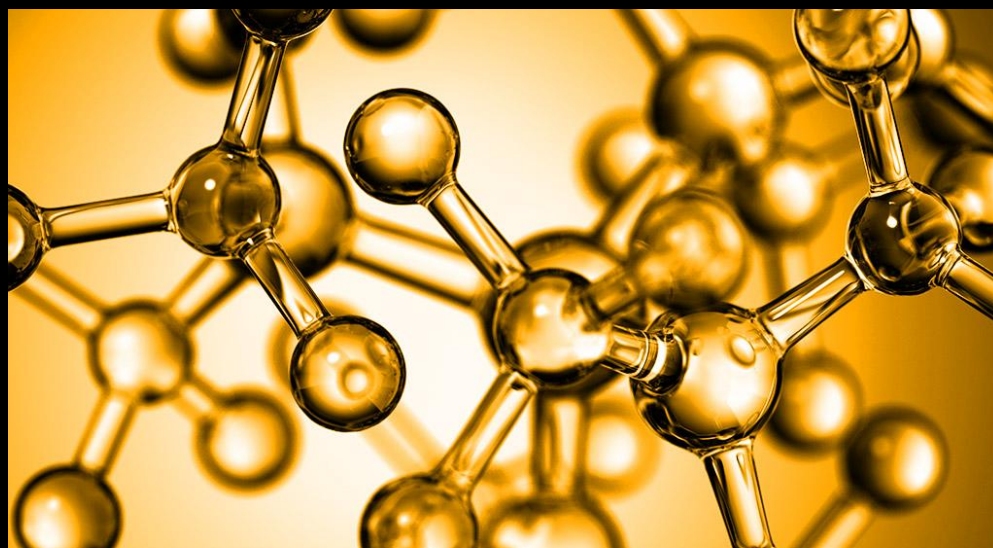


# КВАНТОВАЯ ХИМИЯ



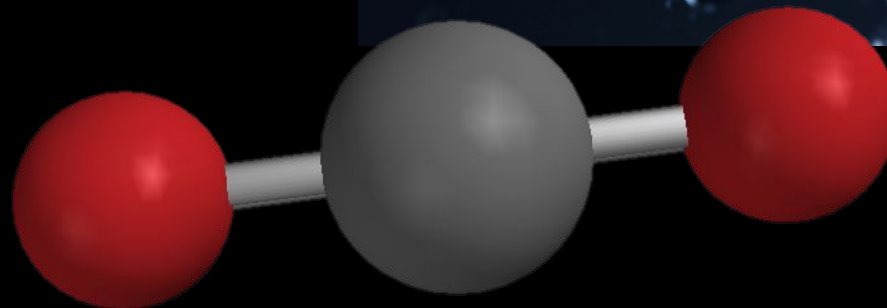
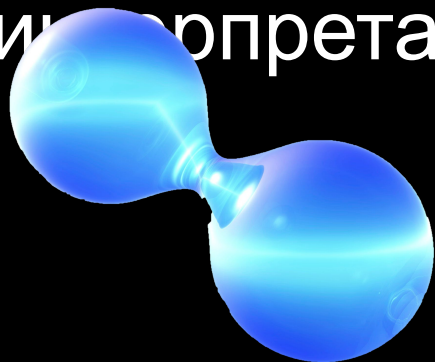
# ИСТОРИЯ

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



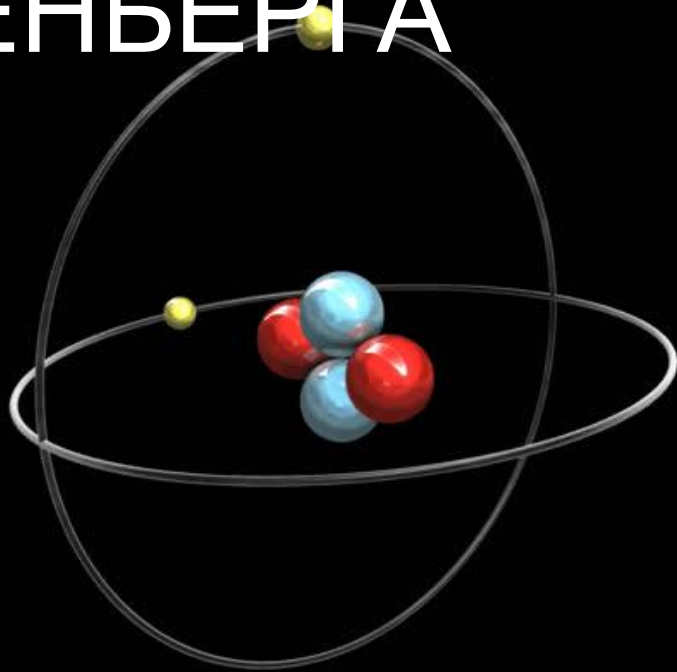
# ПРИЧИНЫ ВОЗНИКНОВЕНИЯ

Экспериментальный материал  
нуждался  
в интерпретации



# ИССЛЕДОВАНИЯ ВЕРНЕРА ГЕЙЗЕНБЕРГА

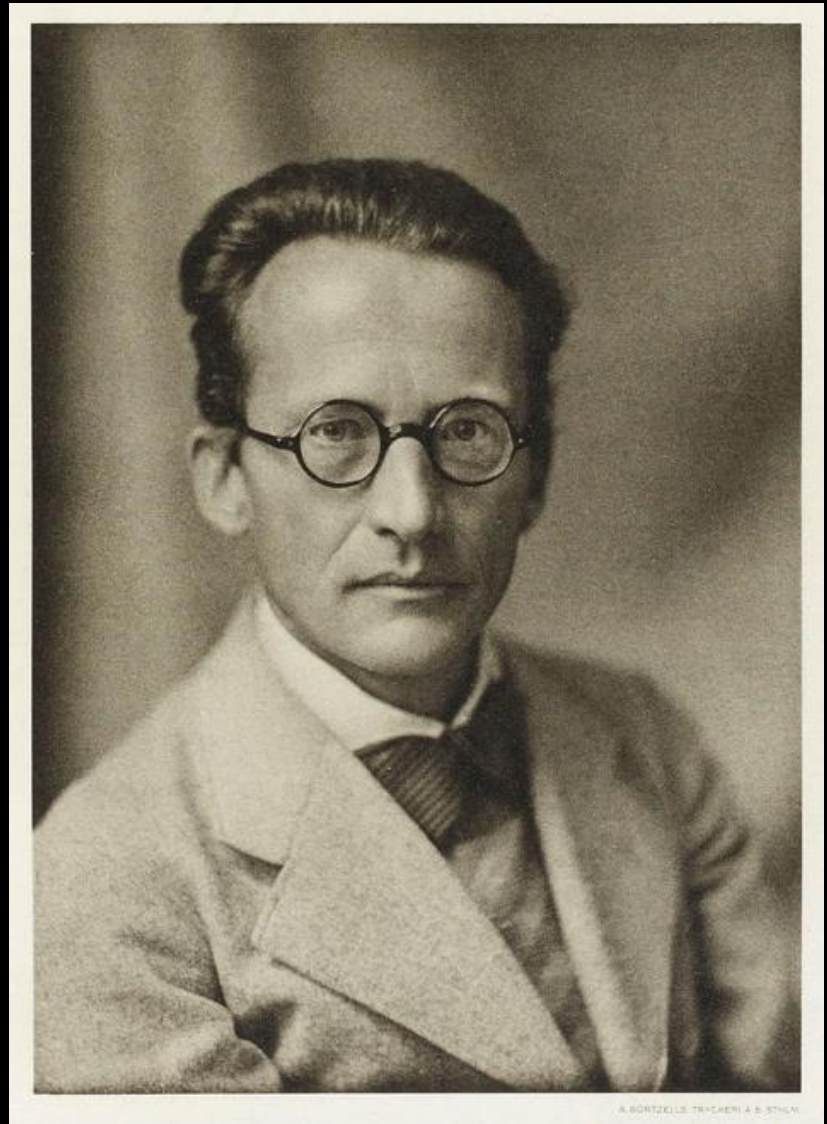
1926 г.



# УРАВНЕНИЕ ШРЁДИНГЕР

## А

Уравнение  
описывает  
изменение  
в пространстве  
и во времени  
ЧИСТОГО СОСТОЯНИЯ.





# ГИПОТЕЗА ДЕ БРОЙЛЯ

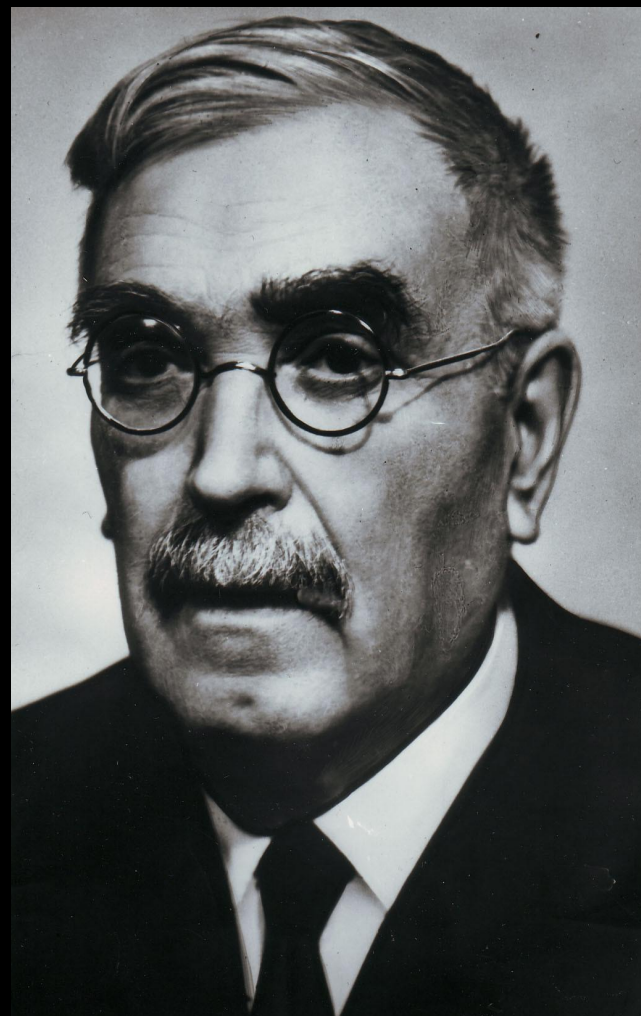
Дуализм не является особенностью только оптических явлений, а имеет универсальный характер. Частицы вещества также обладают волновыми свойствами



# МЕТОД ХАРТРИ-ФОКА

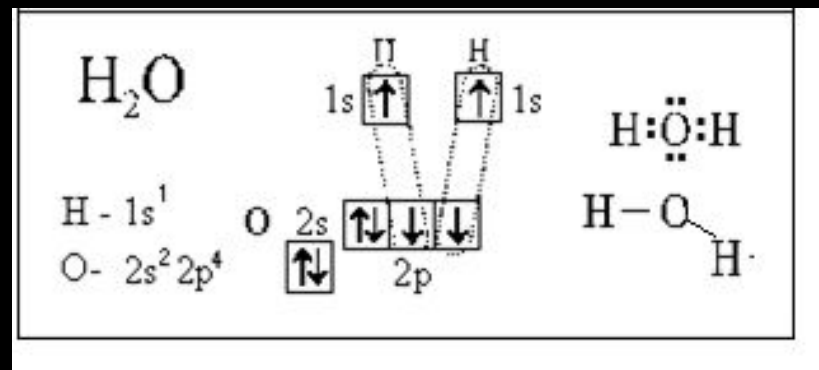
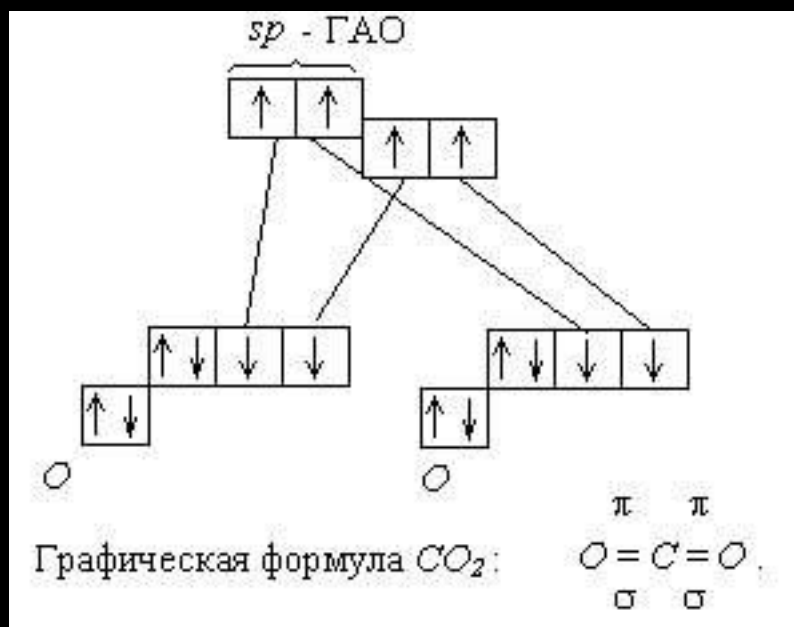


Дуглас Рейнер Хартри



Владимир Александрович  
Фок

# ТЕОРИЯ ВАЛЕНТНЫХ СВЯЗЕЙ





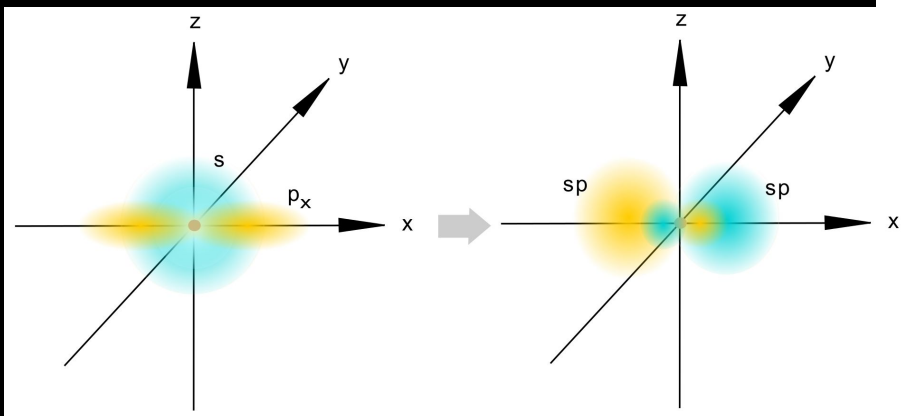
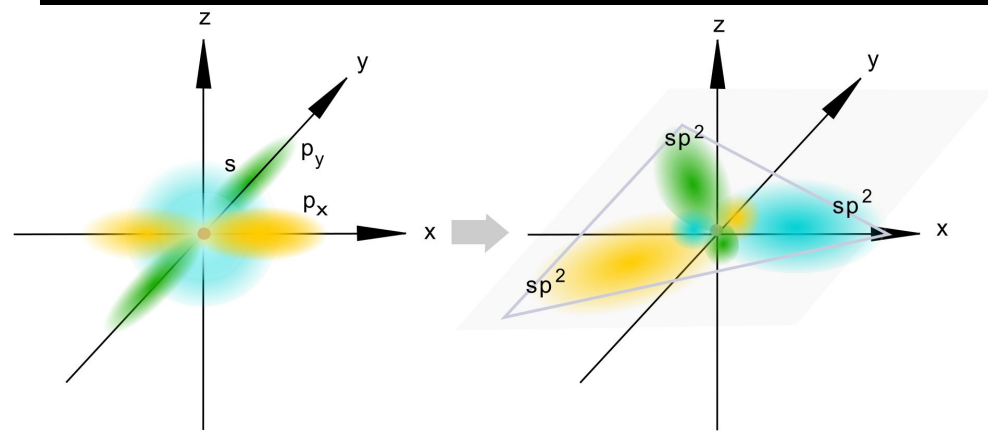
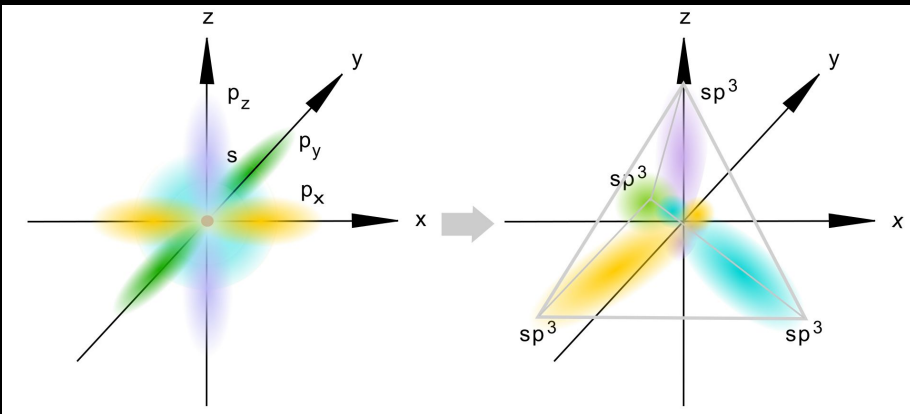


- относительная простота
- помогает легко представить молекулу
- описывает неорганическую химию

—

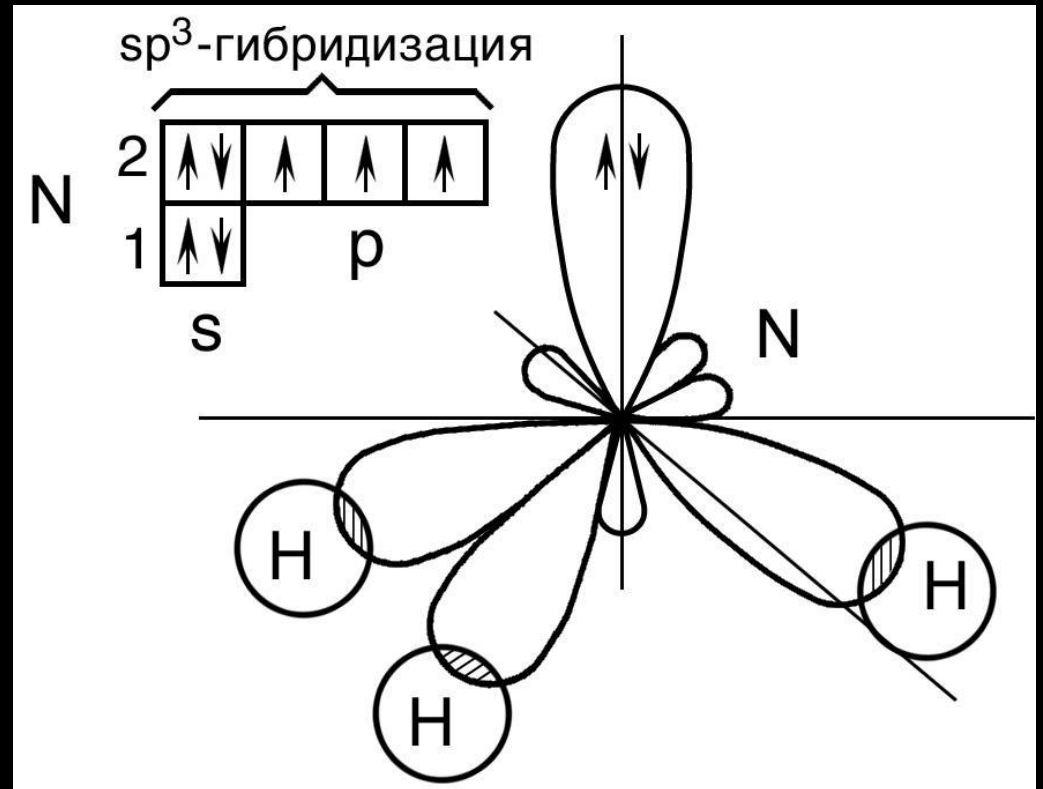
- даёт правильное описание в малой области химических соединений
- малая предсказательная способность
- не даёт магнитных свойств веществ и их геометрию

# ГИБРИДИЗАЦИЯ



# ТЕОРИЯ ГИЛЛЕСПИ

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



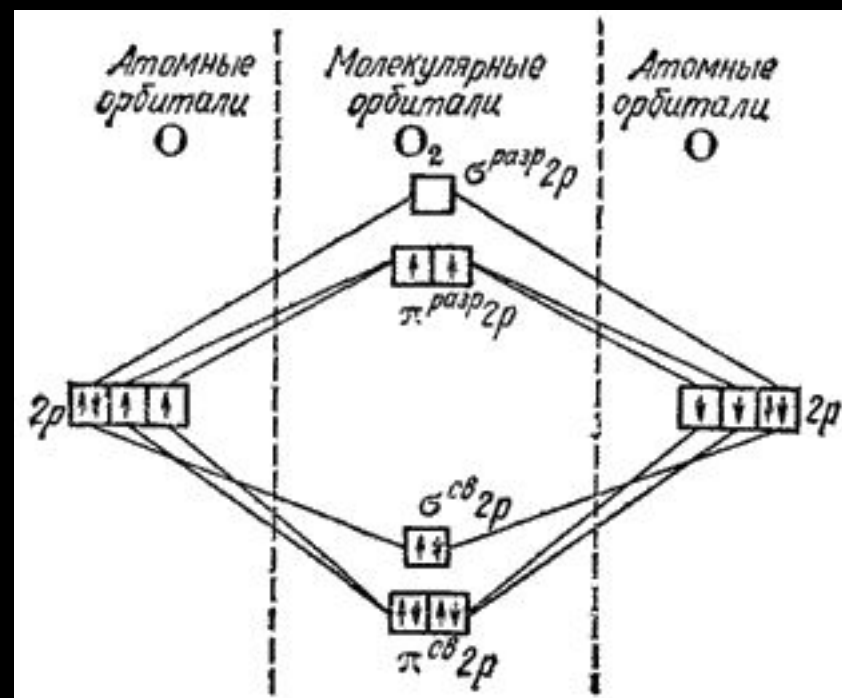
# МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНЫХ ОРБИТАЛЕЙ

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.

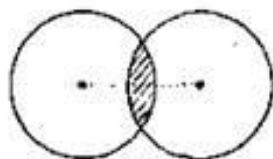




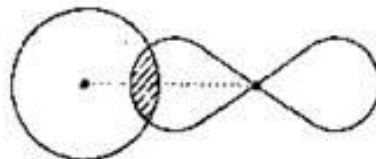
- даёт геометрию молекулы
- объективнее отражает реальность
- имеет сильную предсказательную способность, даже без расчёта
- предсказывает магнитные свойства молекул
- относительная простота математики



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



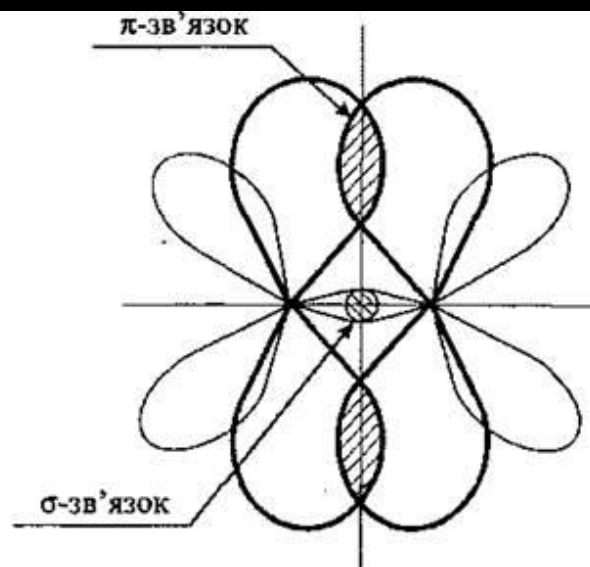
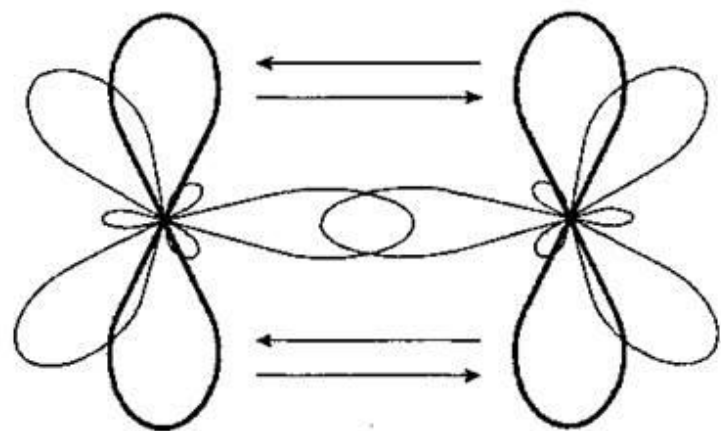
$s-s$ -перекривання (H-H)



$s-p$ -перекривання (H-F)



$p-p$ -перекривання (F-F)



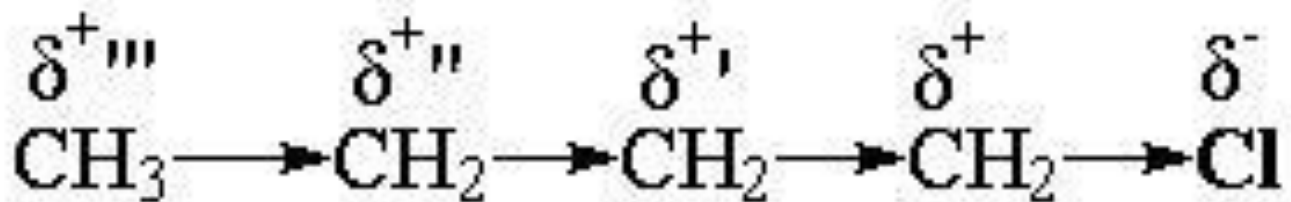
# ЭЛЕКТРОННЫЕ ЭФФЕКТЫ

-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  $\pi$  связей.

