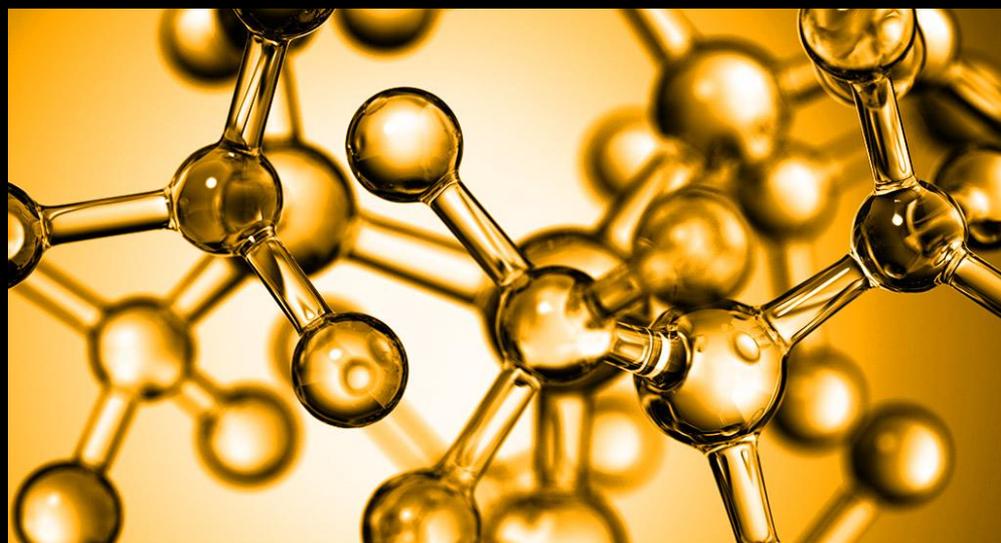


# КВАНТОВАЯ ХИМИЯ



ХИМИЯ

```
graph TD; A[ХИМИЯ] --> B[ОРГАНИЧЕСКАЯ]; A --> C[НЕОРГАНИЧЕСКАЯ]
```

ОРГАНИЧЕСКАЯ

НЕОРГАНИЧЕСКАЯ

ХИМИЯ

ФИЗИЧЕСКАЯ

АНАЛИТИЧЕСКАЯ

ХИМИЧЕСКАЯ  
КИНЕТИКА

ХИМИЧЕСКАЯ  
ТЕРМОДИНАМИКА

ЭЛЕКТРОХИМИЯ

КВАНТОВАЯ  
ХИМИЯ

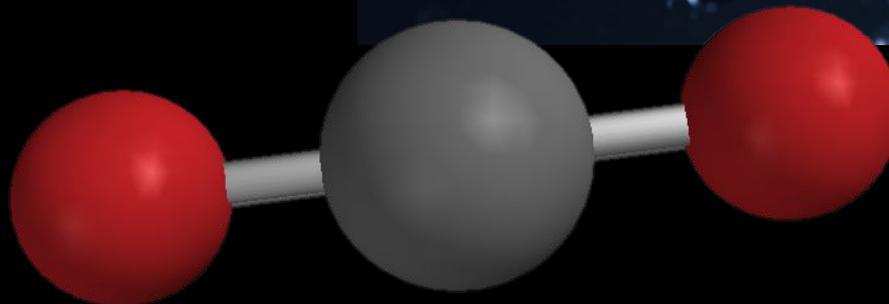
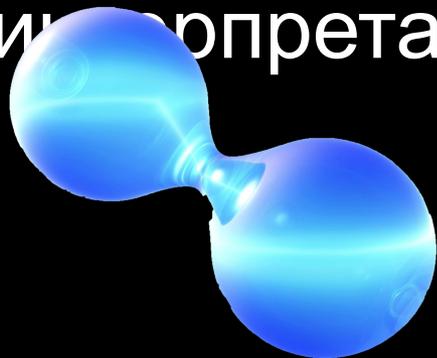
# ИСТОРИЯ

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



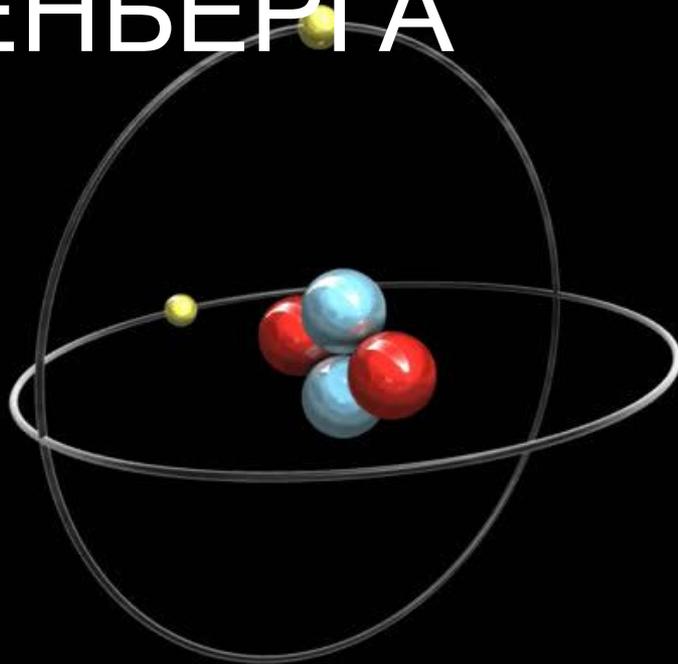
# ПРИЧИНЫ ВОЗНИКНОВЕНИЯ

Экспериментальный материал  
нуждался  
в интерпретации



# ИССЛЕДОВАНИЯ ВЕРНЕРА ГЕЙЗЕНБЕРГА

1926 г.



# УРАВНЕНИЕ ШРЁДИНГЕР

А

Уравнение  
описывает  
изменение  
в пространстве  
и во времени  
ЧИСТОГО СОСТОЯНИЯ.



# ГИПОТЕЗА ДЕ БРОЙЛЯ

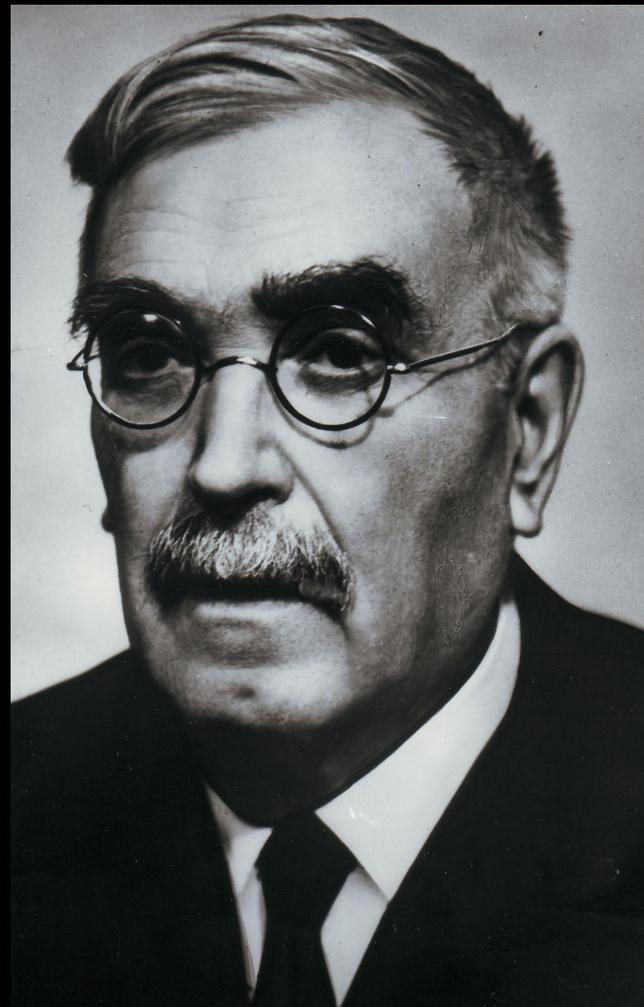
Дуализм не является особенностью только оптических явлений, а имеет универсальный характер. Частицы вещества также обладают волновыми свойствами



# МЕТОД ХАРТРИ-ФОКА

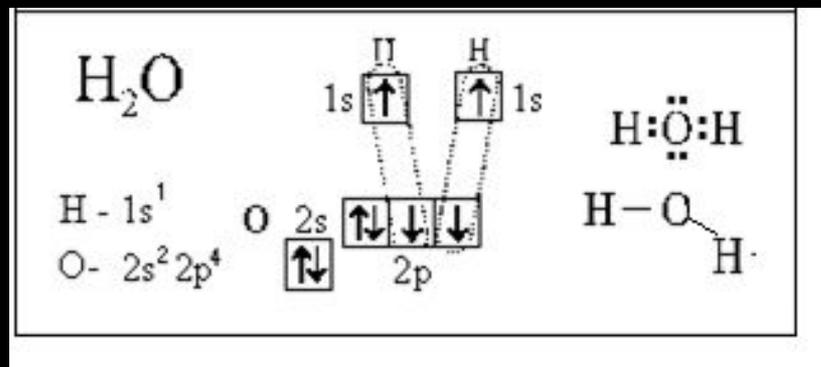
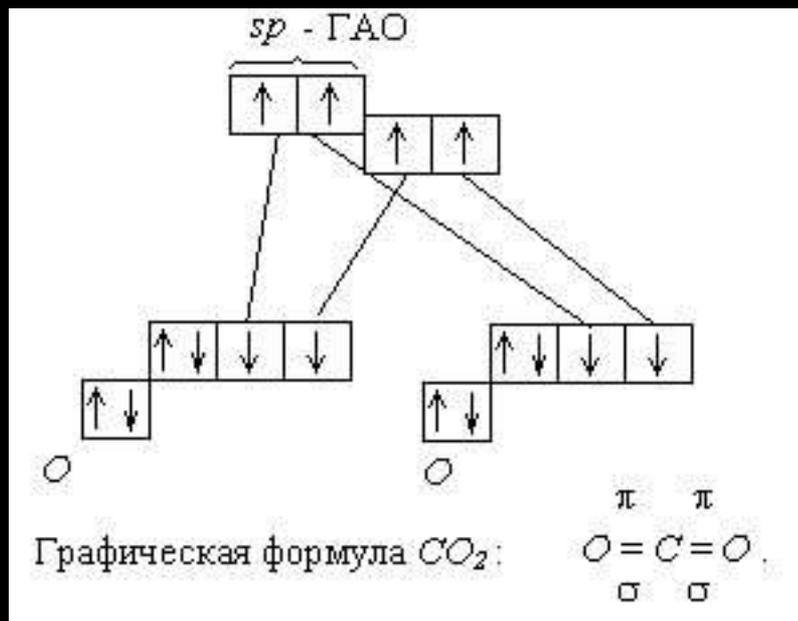


Дуглас Рейнер Хартри



Владимир Александрович  
Фок

# ТЕОРИЯ ВАЛЕНТНЫХ СВЯЗЕЙ



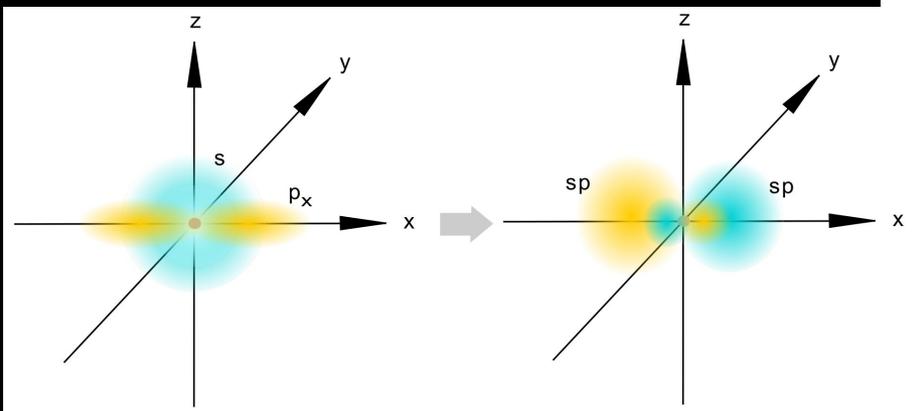
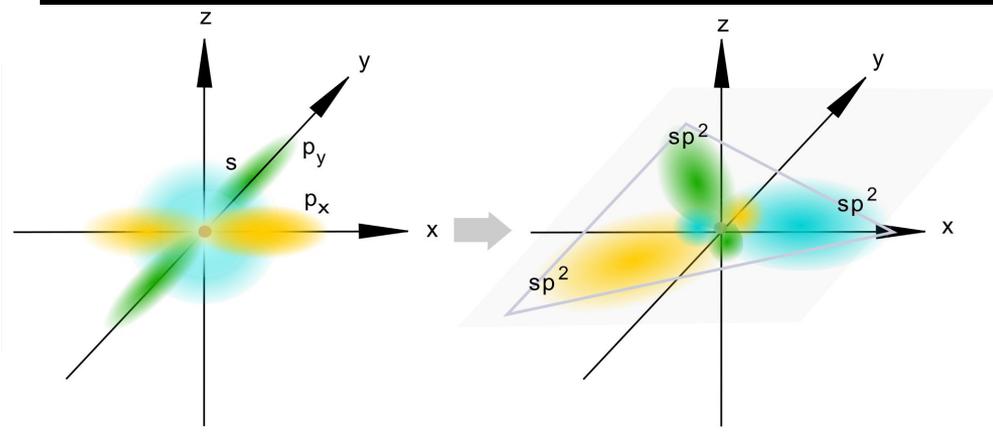
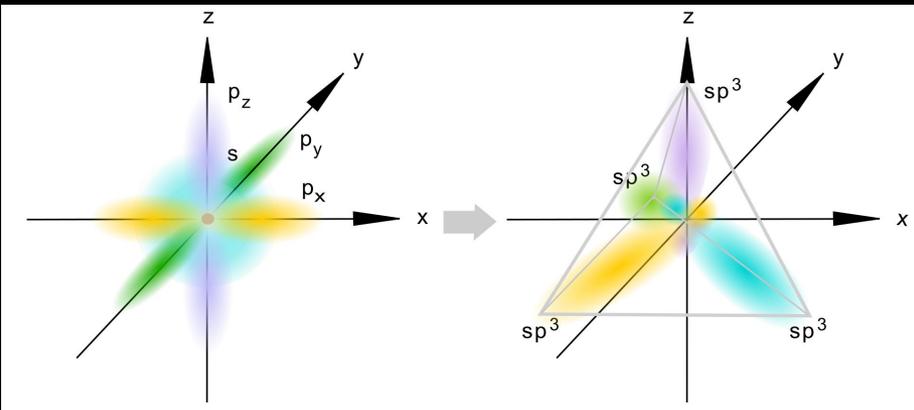


- относительная простота
- помогает легко представить молекулу
- описывает неорганическую химию



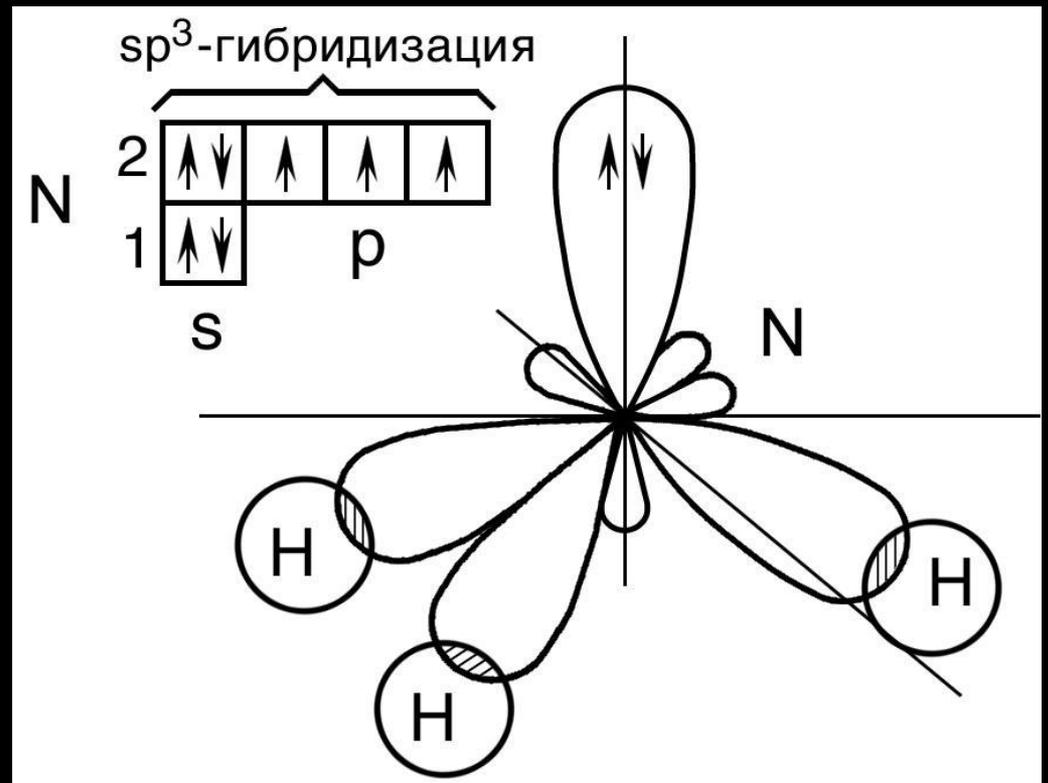
- даёт правильное описание в малой области химических соединений
- малая предсказательная способность
- не даёт магнитных свойств веществ и их геометрию

# ГИБРИДИЗАЦИЯ



# ТЕОРИЯ ГИЛЛЕСПИ

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

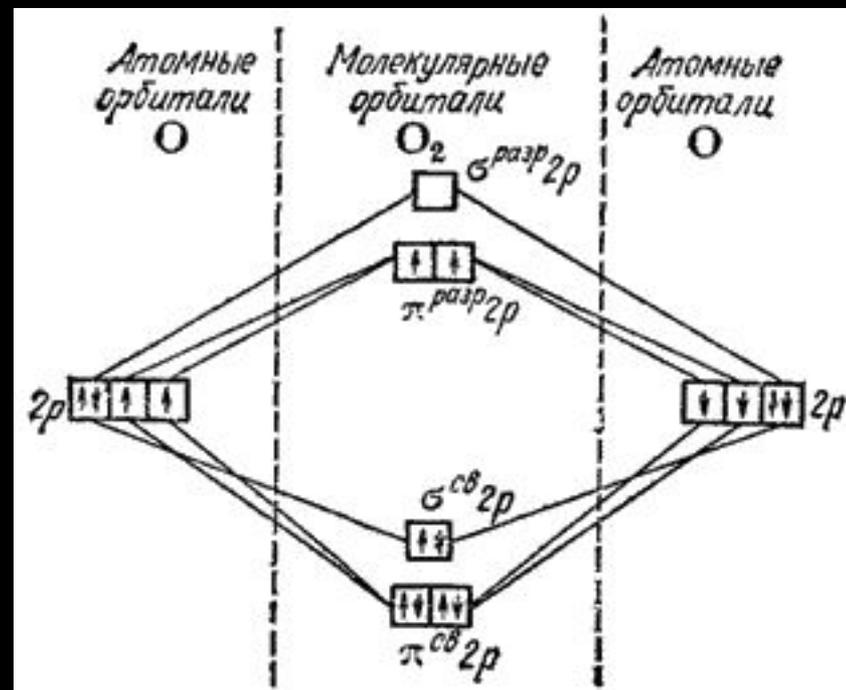


# МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНЫХ ОРБИТАЛЕЙ

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.

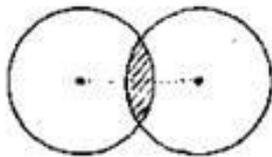




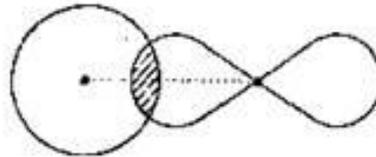
- даёт геометрию молекулы
- объективнее отражает реальность
- имеет сильную предсказательную способность, даже без расчёта
- предсказывает магнитные свойства молекул
- относительная простота математики



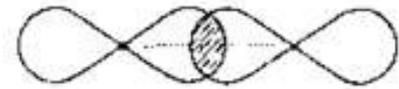
- сложность подбора коэффициента для атомной орбитали
- рост сложности расчёта молекул с ростом количества атомов



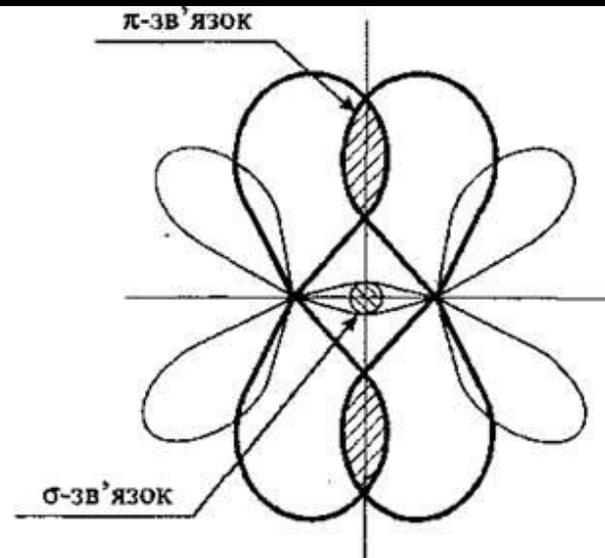
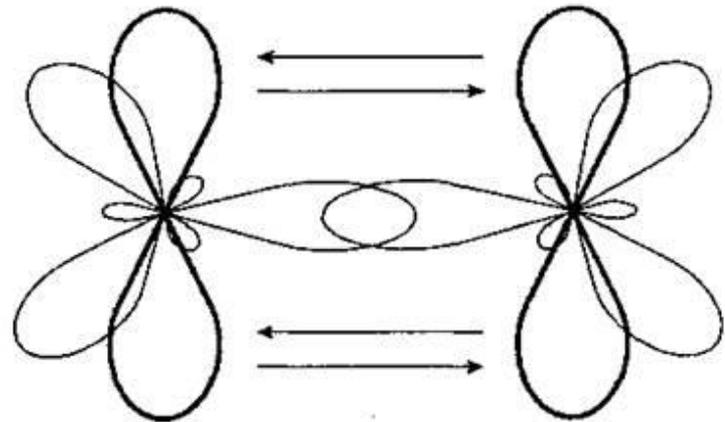
*s-s*-перекривання (H-H)



*s-p*-перекривання (H-F)



*p-p*-перекривання (F-F)

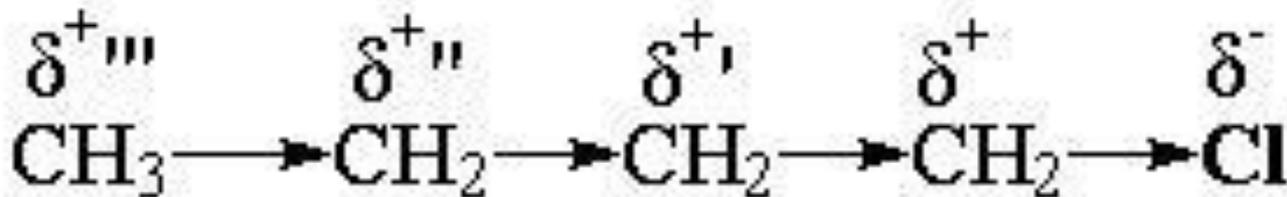


# ЭЛЕКТРОННЫЕ ЭФФЕКТЫ

-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.

