

```
import sys, math
```

```
## CONSTANTS ##
```

```
# threshold bond length for covalent bond detection
bond_thresh = 1.2
```

## Лекції з квантової хімії

```
# covalent (or ionic) radii by atomic element (Angstroms) from
# "Inorganic Chemistry" 3rd ed, Housecroft, Appendix 6, pgs 1013-1014
cov_rads = { 'H': 0.37, 'C': 0.77, 'O': 0.73, 'N': 0.75, 'F': 0.71,
    'P': 1.10, 'S': 1.03, 'Cl': 0.99, 'Br': 1.14, 'I': 1.33, 'He': 0.30,
    'Ne': 0.84, 'Ar': 1.00, 'Li': 0.88, 'Na': 1.02,
    'Mg': 0.72, 'Al': 1.30, 'Si': 1.18, 'K': 1.38, 'Ca': 1.00, 'Sc': 0.75,
    'Ti': 0.86, 'V': 0.79, 'Cr': 0.73, 'Mn': 0.67, 'Fe': 0.61, 'Co': 0.64,
    'Ni': 0.55, 'Cu': 0.46, 'Zn': 0.60, 'Ga': 1.22, 'Ge': 1.22, 'As': 1.22,
    'Se': 1.17, 'Kr': 1.03, 'X': 0.00}
```

Пономаренко С. М.

# Що таке квантова хімія?

```
import sys, math
```

```
## CONSTANTS ##
```

«КВАНТОВА ХІМІЯ, розділ теоретич. хімії, в якому **будова і властивості хімічних сполук**, їх взаємодія і перетворення в хімічних реакціях розглядаються на основі уявлень і за допомогою методів квантової механіки.»

```
cov_rads = { 'H': 0.37, 'C': 0.77, 'O': 0.73, 'N': 0.75, 'Cl': 0.71,
```

```
'P': 1.16, 'S': 1.03, 'F': 0.99, 'I': 1.33, 'Br': 1.00, 'B': 0.30,
```

```
'Li': 0.86, 'Na': 0.75, 'Ca': 0.74, 'Mg': 0.67, 'Be': 0.61, 'Sr': 0.64,
```

```
'Ni': 0.55, 'Cu': 0.46, 'Zn': 0.60, 'Ga': 1.22, 'Ge': 1.22, 'As': 1.22,
```

```
'Al': 0.75, 'Mn': 0.75, 'Cr': 0.75, 'V': 0.75, 'Fe': 0.75, 'Co': 0.75,
```

```
'Ti': 0.86, 'W': 0.75, 'Rb': 0.75, 'Cs': 0.75, 'K': 0.75, 'Ba': 0.75,
```

```
'Tl': 0.86, 'Pb': 0.75, 'Hg': 0.75, 'Sn': 0.75, 'Bi': 0.75, 'Te': 0.75,
```

```
'Au': 0.55, 'Pt': 0.46, 'Cu': 0.46, 'Zn': 0.60, 'Ga': 1.22, 'Ge': 1.22, 'As': 1.22,
```

```
'Al': 0.75, 'Mn': 0.75, 'Cr': 0.75, 'V': 0.75, 'Fe': 0.75, 'Co': 0.75,
```

```
'Ti': 0.86, 'W': 0.75, 'Rb': 0.75, 'Cs': 0.75, 'K': 0.75, 'Ba': 0.75,
```

```
'Tl': 0.86, 'Pb': 0.75, 'Hg': 0.75, 'Sn': 0.75, 'Bi': 0.75, 'Te': 0.75,
```

```
'Au': 0.55, 'Pt': 0.46, 'Cu': 0.46, 'Zn': 0.60, 'Ga': 1.22, 'Ge': 1.22, 'As': 1.22,
```

```
'Al': 0.75, 'Mn': 0.75, 'Cr': 0.75, 'V': 0.75, 'Fe': 0.75, 'Co': 0.75,
```

```
'Ti': 0.86, 'W': 0.75, 'Rb': 0.75, 'Cs': 0.75, 'K': 0.75, 'Ba': 0.75,
```

```
'Tl': 0.86, 'Pb': 0.75, 'Hg': 0.75, 'Sn': 0.75, 'Bi': 0.75, 'Te': 0.75,
```

```
'Au': 0.55, 'Pt': 0.46, 'Cu': 0.46, 'Zn': 0.60, 'Ga': 1.22, 'Ge': 1.22, 'As': 1.22,
```

```
'Al': 0.75, 'Mn': 0.75, 'Cr': 0.75, 'V': 0.75, 'Fe': 0.75, 'Co': 0.75,
```

```
'Ti': 0.86, 'W': 0.75, 'Rb': 0.75, 'Cs': 0.75, 'K': 0.75, 'Ba': 0.75,
```

```
'Tl': 0.86, 'Pb': 0.75, 'Hg': 0.75, 'Sn': 0.75, 'Bi': 0.75, 'Te': 0.75,
```

```
'Au': 0.55, 'Pt': 0.46, 'Cu': 0.46, 'Zn': 0.60, 'Ga': 1.22, 'Ge': 1.22, 'As': 1.22,
```

```
'Al': 0.75, 'Mn': 0.75, 'Cr': 0.75, 'V': 0.75, 'Fe': 0.75, 'Co': 0.75,
```

```
'Ti': 0.86, 'W': 0.75, 'Rb': 0.75, 'Cs': 0.75, 'K': 0.75, 'Ba': 0.75,
```

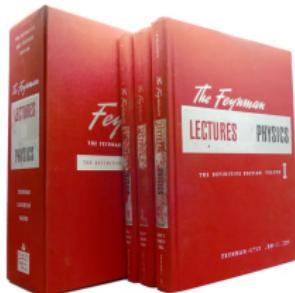
Як людство прийшло то поняття атомно-молекулярної будови речовини і при чому тут кванти?

# Історія розвитку уявлень про будову матерії

## Найважливіша гіпотеза

```
import sys, math
#dav
#b
#c
    : 0
    'P': 1.10, 'S': 1.05,
    'Ne': 0.84, 'Ar': 1.15,
    'Mg': 0.72, 'Al': 1.30, 'Si': 1.15, 'K': 1.35, 'Ca': 1.00, 'Sc': 0.75,
    'Ti': 0.86, 'V': 0.79, 'Cr': 0.73, 'Mn': 0.67, 'Mg': 0.61, 'Co': 0.64,
    'Ni': 0.55, 'Cu': 0.46, 'Zn': 1.22, 'As': 1.22,
    'Se': 1.17, 'Kr': 1.03, 'X' :
```

Якщо внаслідок якоїсь катастрофи все наукове знання було б знищено і тільки одне речення могло б бути передане наступним поколінням людей, який вислів дав би найбільшу інформацію в найменшій кількості слів? Я вірю, що це атомна гіпотеза... що всі речі складаються з атомів — маленьких частинок, які перебувають у безперервному русі, притягуються одна до одної на малих відстанях і відштовхуються під час стиснення.



# Історія розвитку уявлень про будову матерії

Чи існують атоми?



```

import sys, re
#  
## CONSTANTS  
  
# threshold for bond detection  
bond_thresh = 0.05  
  
# covalent (0.05)  
# "Inorganic" (0.05)  
cov_rads = {  
    'P' : 1.10,  
    'Ne' : 0.84,  
    'Mg' : 0.72, 'Al' : 1.30, 'Si' : 1.18, 'K' : 1.38, 'Ca' : 1.00, 'Sc' : 0.75,  
    'Ti' : 0.86, 'V' : 0.79, 'Cr' : 0.73, 'Mn' : 0.67, 'Fe' : 0.61, 'Co' : 0.64,  
    'Ni' : 0.93, 'Cu' : 0.10, 'Zn' : 0.85, 'Ga' : 0.80, 'Ge' : 0.85, 'As' : 0.85,  
    'Se' : 1.00
  }
  
```

- Закон збереження маси, (1789 році Антуаном Лораном Лавуазье) — маса речовини при хімічній реакції не змінюється;

- Закон сталості складу (1799 році Жозефом Луї Прустом) — будь-яка хімічна сполука, не залежно від способу її отримання, складається з одних і тих же хімічних елементів («елементи» — це прості речовини);
- Закон кратних відношень (1803, Джон Дальтон) — якщо два елементи утворюють кілька сполук, маси одного елемента відносяться як прості числа. Приклад: CO (C:O = 12:16) і CO<sub>2</sub> (C:O = 12:32) → відношення 1:2.

# Історія розвитку уявлень про будову матерії

Як атоми взаємодіють?

Єнс Якоб Берцеліус — 1818, електрохімічна теорія хімічного зв'язку.

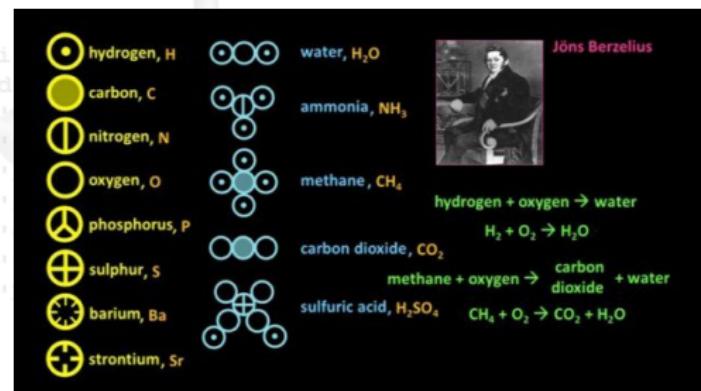
```
import sys, math
```

```
## CONSTANTS ##
```

```
# threshold beyond average of covalent radii to determine bond cutoff
bond_thresh = 1.2
```

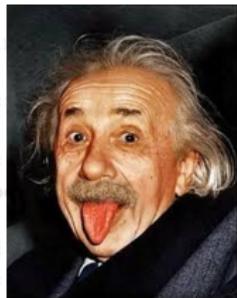


```
# covalent radii (in Angstroms) from "Handbook of Chemistry" 3rd ed., 1852
# "average" of two radii to get a single value for each element
cov_radii = {
    "hydrogen": 0.37,
    "carbon": 1.03,
    "nitrogen": 1.00,
    "oxygen": 1.30,
    "phosphorus": 0.79,
    "sulphur": 0.46,
    "barium": 1.17,
    "strontium": 1.03,
```



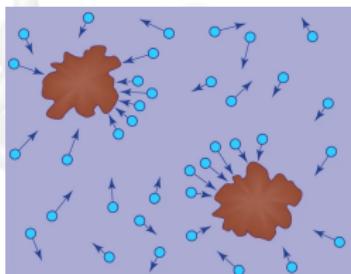
# Історія розвитку уявлень про будову матерії

І тут Ейнштейн!



Альберт Ейнштейн у 1905 році дав кількісний опис броунівського руху — хаотичного руху мікрочастинок у рідині чи газі. Він показав, що ця випадкова поведінка є наслідком теплового руху молекул середовища. Його теорія підтвердила атомістичну будову матерії та дала спосіб обчислювати розміри молекул і число Авогадро.

Вільгельм Освальд — авторитет у фізичній хімії, прихильник «енергетизму» — відкидав атоми як «гіпотетичні сутності». Коли молодий Ейнштейн опублікував роботу про броунівський рух (1905), Освальд як редактор журналу спершу відхилив її як «незначну». Лише наполягання колег змусило його прийняти статтю. Згодом, після експериментів Перрена, які підтвердили передбачення Ейнштейна, Освальд визнав реальність атомів і фактично капітулював у цій суперечці.

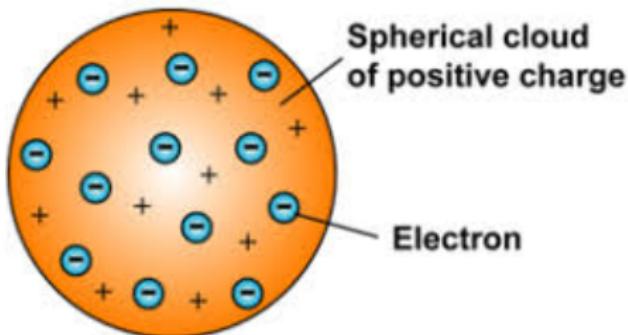


# Історія розвитку уявлень про будову матерії

А-том вже не атом

Дж. Дж. Томсон — 1906, Нобелівська премія за відкриття електрона.

import sys, math



```
## CONSTANTS ##  
# the average of bond  
# covalent radii k  
# "Inorganic Chemistry" 3rd e  
cov : 0.37, 'C':  
'O': 1.03, 'Cl':  
'N': 1.00, 'Li':  
'F': 0.77, 'Si':  
'Ti': 0.86, 'V': 0.79, 'Cr': 0.73, 'Mn': 0.67, 'Fe': 0.61, 'Co': 0.64,  
'Ni': 0.55, 'Cu': 0.46, 'Zn': 0.60, 'Ga': 1.22, 'Ge': 1.22, 'As': 1.22,  
'Se': 1.17, 'Kr': 1.03, 'X' : 0.00}
```

# Історія розвитку уявлень про будову матерії

Атом подібний до сонячної системи?

1911, планетарна модель атома Резерфорда

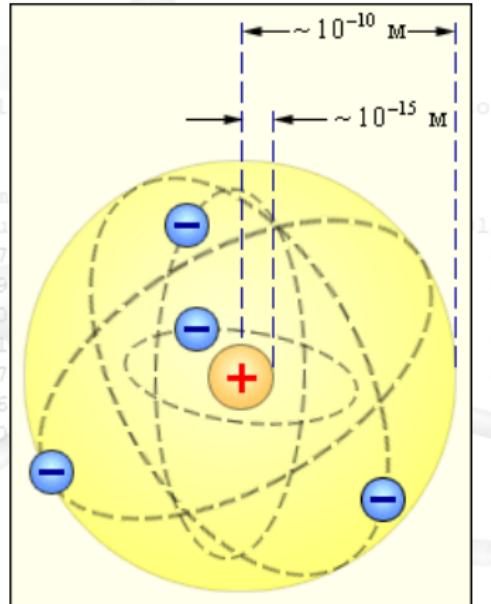
```
import sys, math
```

```
## CONSTANTS ##
```

```
# threshold beyond average of covalent bond thresh = 1.2
```



```
# cov (covalent) radii by atom
# "Inorganic Chemistry" 3rd ed, House of
cov [ ] = [ ]
    'H': 0.37, 'C': 0.71
    'B': 1.03, 'Cl': 0.90
    'N': 1.00, 'Li': 1.02
    'Mg': 1.30, 'Si': 1.14
    'O': 0.79, 'Cr': 0.75
    'F': 0.46, 'Zn': 0.64
    'S': 1.17, 'Al': 1.03, 'X': 0.0
```



```
off
14
0.71,
0.30,
1.02,
0.75,
0.64,
1.22,
```

# Історія розвитку уявлень про будову матерії

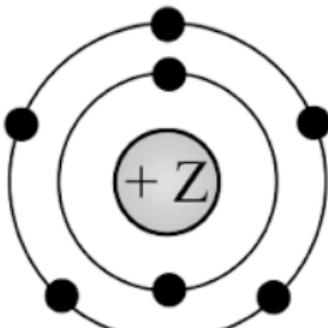
## Менделеєв і його пріодичний закон

1913, зв'язок між зарядом ядра, атомним номером і положенням атома в періодичній таблиці Д. I. Менделеєва

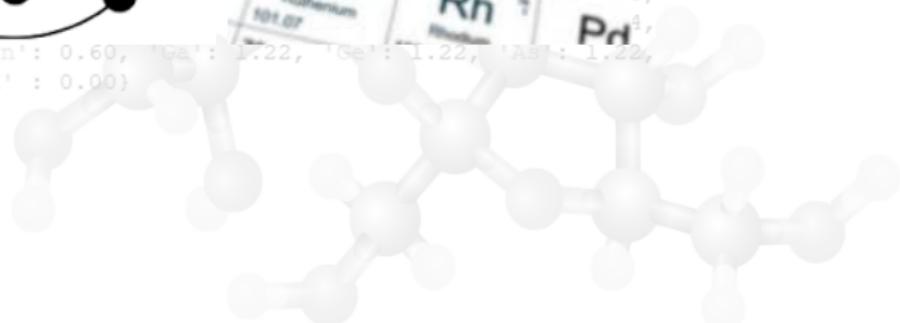
```
## CONSTANTS ##
```

```
# threshold beyond which atoms are considered bonded
bond_thresh = 1

# covalent (or ionic) radius for various elements
# "Inorganic Chemistry" by J. H. Moore
cov_rads = {
    'P': 1.10, 'S': 1.05, 'Cl': 0.95, 'Br': 0.85, 'I': 0.75, 'F': 0.65,
    'Ne': 0.84, 'Ar': 0.75, 'Kr': 0.65, 'Xe': 0.55, 'Rn': 0.45, 'He': 0.45,
    'Mg': 0.72, 'Ca': 0.85, 'Sr': 0.95, 'Ba': 1.05, 'Ra': 1.15, 'Li': 0.65,
    'Ti': 0.86, 'V': 0.95, 'Cr': 0.95, 'Mn': 0.95, 'Fe': 0.95, 'Co': 0.95,
    'Ni': 0.95, 'Cu': 0.95, 'Zn': 0.95, 'Ga': 1.22, 'Ge': 1.22, 'As': 1.22,
    'Se': 1.17, 'Kr': 1.03, 'X': 0.00}
```



In	26	Fe	27	Co	28	Ni
Inert Gas		Iron		Cobalt		Nickel
	55.845		58.933195		58.9034	
	44		45		46	
	Ru		Rh		Pd	
	101.07					



# Історія розвитку уявлень про будову матерії

## Квантовий атом

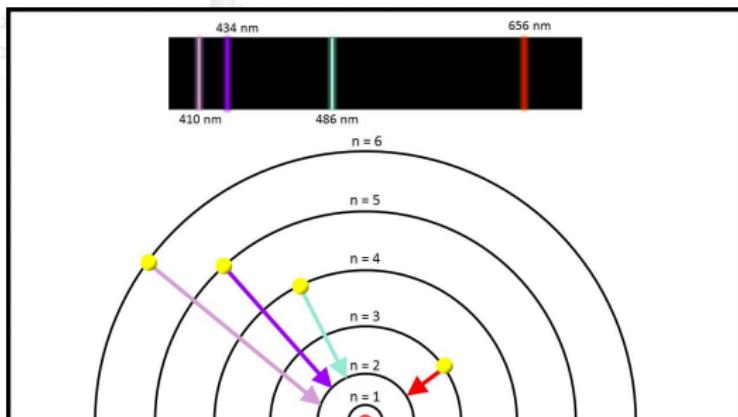
Нільс Бор — 1913, перша квантова теорія воднеподібного атома.

```
import sys, math
```

```
## CONSTANTS ##  $E_1, E_2, \dots, E_n, \dots, mv_n r_n = n\hbar, \hbar\omega = E_m - E_n$ 
```

```
# threshold beyond average of covalent radius to determine bond cutoff  
bond_thresh = 1.2
```

```
# covalent (or ionic) rad  
# "Inorganic Chemistry" 3  
cov  
cov[1] : 0.37,  
cov[2] : 1.03,  
cov[3] : 1.00,  
cov[4] : 1.30,  
cov[5] : 0.79,  
cov[6] : 0.46,  
cov[7] : 1.03,
```



# Історія розвитку уявлень про будову матерії

Частинка — хвиля?

1923, хвильова теорія речовини Л. де Броїля

```
import sys, math
```

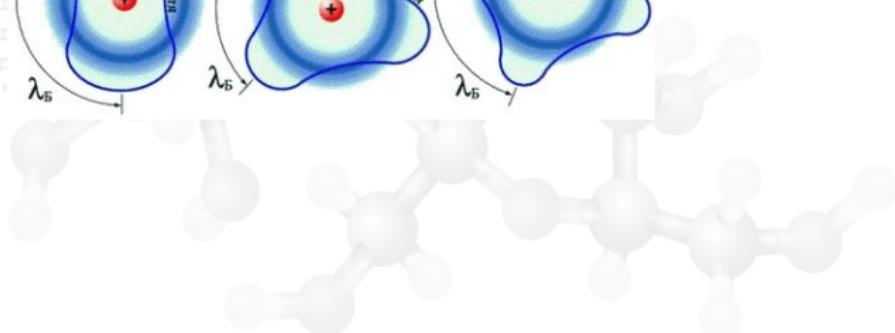
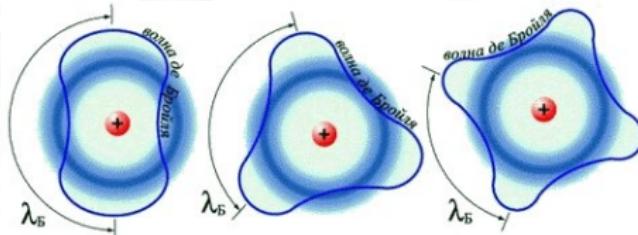
```
## CONSTANTS ##
```

```
# threshold beyond average of covalent radii to determine bond cutoff
bond_thresh = 1.2
```

```
# covalent radii (in Angstroms) by atomic element (Angstroms) from
```

```
# "The Elements of Chemistry" 3rd edn
cov = {
    'H': 0.37, 'C': 1.03, 'O': 1.00,
    'N': 1.30, 'Si': 0.79, 'Cr': 0.46,
    'Zr': 1.03, 'X': 0.37}
```

$$p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} = \hbar k$$



# Історія розвитку уявлень про будову матерії

Частина — де вона?

1923, принцип невизначеності Гейзенберга

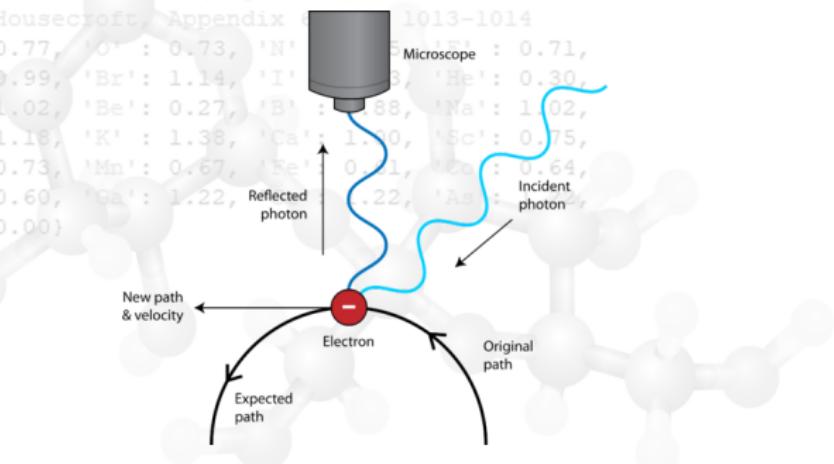
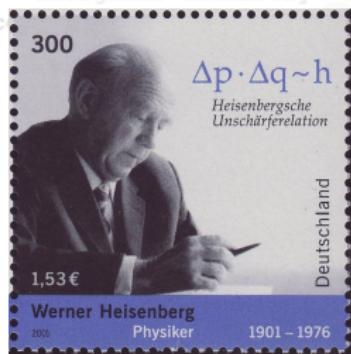
```
import sys, math
```

```
## CONSTANTS ##
```

```
# threshold beyond average of covalent radii to determine bond cutoff
bond_thresh = 1.2
```

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

```
# covalent (or ionic) radii by atomic element (Angstroms) from
# "Inorganic Chemistry" 3rd ed, Housecroft, Appendix 1, 1013-1014
```



# Історія розвитку уявлень про будову матерії

У нас є механіка!

1926, матрична механіка В. Гайзенберга, нерелятивістське хвильове рівняння Е. Шредінгера

## CONSTANTS ##

```
# threshold
bond_thresh
```

```
# covalent
# "Inorganic"
cov_rads =
    "P": 1.1
    "Ne": 0.8
    "Mg": 0.7
    "Ti": 0.8
    "Ni": 0.5
```



```
covalent radii
atomic element
Housecroft, Ar
0.77, 'O': 0
0.99, 'Br': 1
1.02, 'Be': 0
1.18, 'K': 1.38,
0.73, 'Mn': 0.67,
0.60, 'Ga': 1.22,
```



$$q = \begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & q_{13} & \dots \\ q_{21} & q_{22} & q_{23} & \dots \\ q_{31} & q_{32} & q_{33} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}; \quad p = \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} & \dots \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} & \dots \\ p_{31} & p_{32} & p_{33} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H}\Psi$$

Planck's constant      square root of minus one      Hamiltonian operator  
rate of change      with respect to time      quantum wavefunction

# Історія розвитку уявлень про будову матерії

Erwin with his psi ...

```
import sys, math
```

```
## CONSTANTS ##
```

```
# threshold beyond average of covalent radii to determine bond cutoff
bond_thresh = 1.2
```

$$\hat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

```
# covalent (or ionic) radii by atomic element (Angstroms) from
```

# "IUPAC Compendium of Chemical Data" 2007  
 Свого часу серед фізиків ходила епіграма на Шредінгера, складена  
 на англійській та німецькій мовах і приписувана Е. Хюкkelю:

```
'P': 1.10, 'S': 1.03, 'Cl': 0.99, 'Br': 1.14, 'I': 1.33, 'He': 0.30,  

'Ne': 0.84, 'Ar': 1.00, 'Li': 1.02, 'Be': 0.27, 'B': 0.88, 'Na': 1.02,  

'Mg': 0.72, 'Al': 1.30, 'Si': 1.17, 'P': 1.10, 'S': 0.72, 'Cl': 0.73, 'Br': 0.74,  

'Ti': 0.86, 'V': 0.79, 'Cr': 0.65, 'Mn': 0.61, 'Fe': 0.64, 'Co': 0.64,  

'Ni': 0.55, 'Cu': 0.46, 'Zn': 0.60, 'Ga': 1.22, 'As': 1.22,
```

*Erwin with his psi can do  
 Calculations quite a few  
 But one thing has not been seen  
 Just what does psi really mean?*

$\Psi - ?$

# Історія розвитку уявлень про будову матерії

Де електрон? Ймовірно він ...

Макс Борн — 1926, ймовірнісна інтерпретація хвильової функції.

## CONSTANTS ##

```
# threshold beyond average of covalent radii to determine bond cutoff
bond_thresh = 1.2
```

# covalent (or ionic) radii by atomic element (Angstroms) from

```
# "Handbook of Chemistry and Physics" 3rd ed., Bond Radii, Appendix B, 1913-14
# cov
cov = { "H": 0.37, "C": 0.73, "N": 0.75, "O": 0.71,
        "F": 0.79, "Cl": 1.03, "Br": 1.11, "I": 1.18,
        "Li": 1.02, "Be": 0.27, "B": 0.88, "Na": 1.02,
        "Mg": 0.79, "Al": 1.00, "K": 1.38, "Ca": 1.00, "Sc": 0.75,
        "Ti": 0.73, "V": 0.96, "Cr": 0.73, "Mn": 0.67, "Fe": 0.61, "Co": 0.64,
        "Ni": 0.66, "Zn": 0.60, "Ga": 1.22, "Ge": 1.22, "As": 1.22,
        "Se": 1.03, "X": 0.00}
```



$$W = \int |\Psi|^2 dV$$

«є ймовірність того, що електрон буде  
знайдено саме в елементі об'єма  $dV$ »

# Історія розвитку уявлень про будову матерії

Де електрон? Ймовірно він ...

Макс Борн — 1926, ймовірнісна інтерпретація хвильової функції.

## CONSTANTS ##

```
# threshold beyond average value of bond cutoff
bond_thresh = 1.2
```

# covalent (or ionic) radii by atomic element (Angstroms) from

```
# "Molecular Radii" 3
# add Boron
cov = { "H": 0.37, "C": 0.73, "O": 0.73, "N": 0.75, "F": 0.71,
       "B": 1.03, "Si": 1.30, "P": 1.30, "S": 1.30, "Cl": 1.30,
       "Al": 1.00, "Ge": 1.38, "As": 1.38, "Ar": 1.38, "K": 1.38,
       "Mg": 0.79, "Ca": 1.00, "Sc": 0.75, "Ti": 0.75,
       "Na": 0.67, "Be": 0.61, "Zn": 0.64, "Ga": 0.64,
       "Li": 0.46, "Rb": 0.67, "Mn": 0.67, "Cs": 0.67,
       "Mg": 1.03, "Xe": 1.03, "Fr": 1.03 }
```



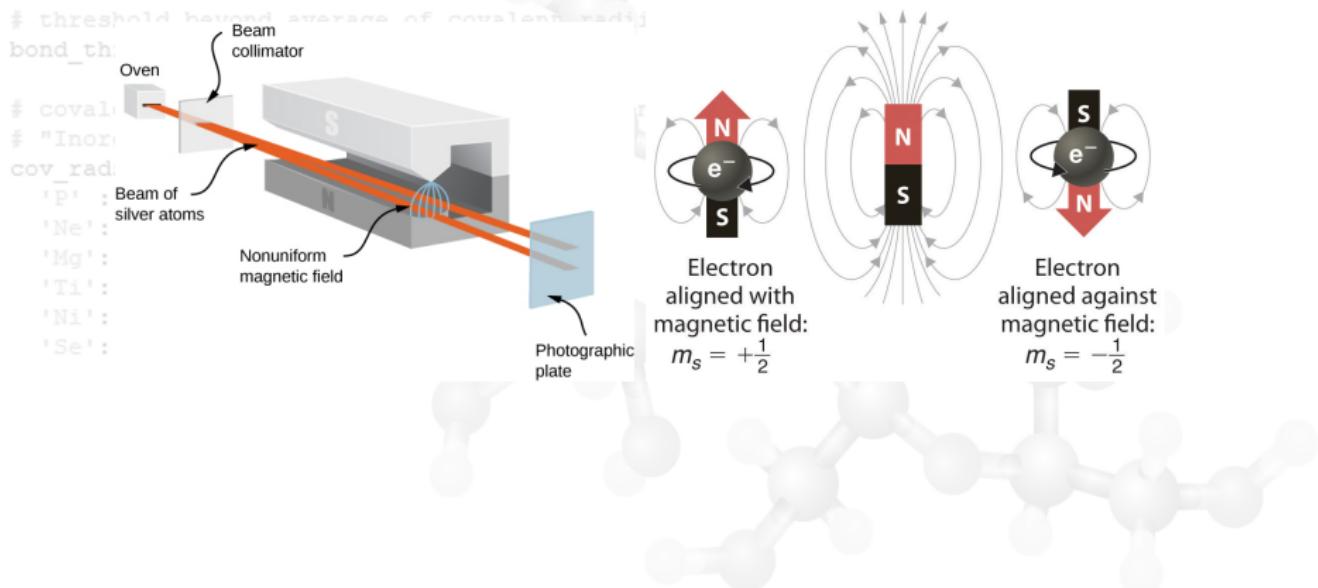
$$\mathbf{p} = \int e|\Psi|^2 \mathbf{r} dV = \int \rho \mathbf{r} dV$$

*В классической теории излучение определяется ...скоростью изменения  $\mathbf{p}$  во времени. В волновой механике дипольный момент  $\mathbf{p}$  легко вычисляется ... для всех стационарных состояний атома в этом интеграл обращается в нуль, так что производная дипольного момента, а вместе с ней и излучение равны нулю; таким образом, в стационарных состояниях излучение отсутствует. Это объясняет ...что вращающийся вокруг ядра электрон может двигаться по своей орбите, не излучая ....*

# Історія розвитку уявлень про будову матерії

## Електрон — юла і магнітик

Отто Штерн і Вальтер Герлах — 1922, дослід з розщепленням пучка іонів срібла, який показав, що проекція магнітного моменту електрона квантується, і може набувати лише двох значень.



# Історія розвитку уявлень про будову матерії

## Електрони — індивідуалісти

В. Паулі — 1925, принцип виключення Паулі

## CONSTANTS ##

$$\psi_A(\vec{r}_1, \sigma_1; \vec{r}_2, \sigma_2; \dots; \vec{r}_i, \sigma_i; \dots; \vec{r}_j, \sigma_j; \vec{r}_N, \sigma_N) = \\ \# \text{ threshold beyond average of covalent radii to determine bond cutoff} \\ \# \text{ bond_thresh = 1.2} \\ = -\psi_A(\vec{r}_1, \sigma_1; \vec{r}_2, \sigma_2; \dots; \vec{r}_j, \sigma_j; \dots; \vec{r}_i, \sigma_i; \vec{r}_N, \sigma_N)$$

# covalent (or ionic) radii by atomic element (Angstroms) from

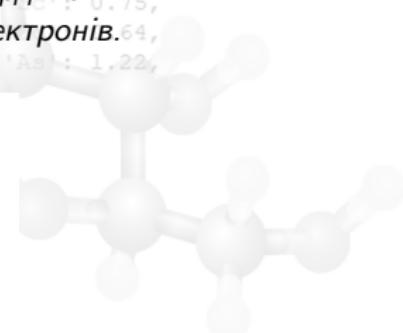
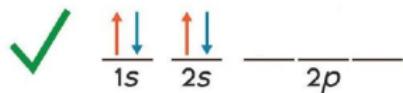
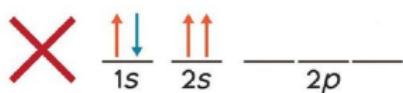
# "Inorganic Chemistry" 3rd ed., Housecroft, Appendix 6, pgs 1013-1014

cov

'B': 0.37, 'C': 0.79, 'N': 0.95, 'O': 0.88, 'F': 0.70, 'Ne': 0.90, 'Mg': 1.30, 'Al': 1.22, 'Si': 1.17, 'P': 1.15, 'S': 1.03, 'Cl': 1.00, 'Ar': 1.03, 'K': 1.37, 'Ca': 1.22, 'Sc': 1.15, 'Ti': 1.15, 'V': 1.15, 'Cr': 1.15, 'Mn': 1.15, 'Fe': 1.15, 'Co': 1.15, 'Ni': 1.15, 'Cu': 1.15, 'Zn': 0.60, 'Ga': 1.22, 'Ge': 1.22, 'As': 1.22, 'Se': 1.15, 'X': 0.00



Система частинок з напівцілыми спінами, має описуватися хвильовою функцією, яка змінює знак при перестановці координат і спінових змінних будь-якої пари електронів.



# Історія розвитку уявлень про будову матерії

## Таємниця валентного штриха!

Після відкриття електрона стало можливим подальший розвиток теорії зв'язку. З'являються Косселя (1915) і електронна теорія валентності Льюїса (1916), яка є найбільш загальною і охоплює основні типи хімічного зв'язку — ковалентну і іонну.

- Коссель (1915) — іонна теорія хімічного зв'язку.
- Льюїса (1916) — електронна теорія валентності: хімічний зв'язок утворюється парою електронів.

Основним досягненням електронних теорій Косселя і Льюїса слід вважати те, що вони, аби відродити правильний електрохімічний підхід Берцеліуса до розуміння природи хімічного зв'язку, використовували все цінне, що було досягнуто завдяки «структурній» теорією валентності.

# Історія розвитку уявлень про будову матерії

Молекула... Ні, давайте спочатку йон!

1927, О. Бароу розв'зує рівняння Шредінгера для молекулярного іона водню  $\text{H}_2^+$

## CONSTANTS ##

```
# threshold beyond average
bond_thresh = 1.2
```

```
# covalent (or ionic)
```

```
# "Inorganic Chemistry"
```

```
cov_rads = { 'H': 0.0,
```

```
'P': 1.10, 'S': 1.0,
```

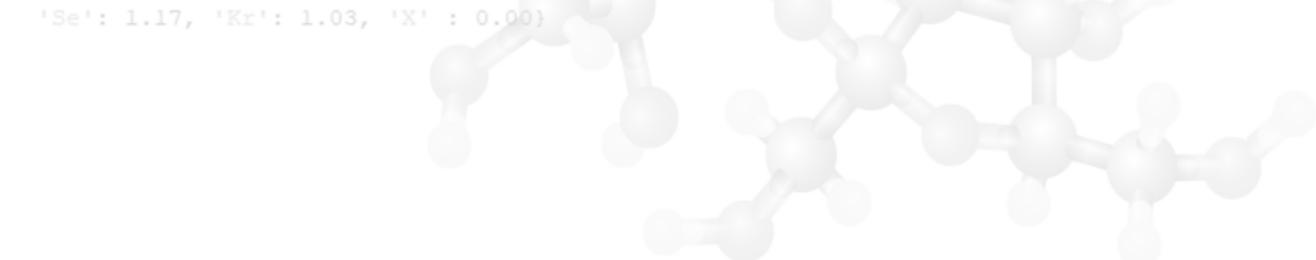
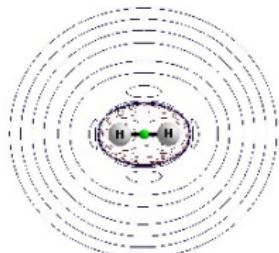
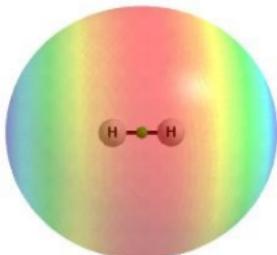
```
'Ne': 0.84, 'Ar': 1.0,
```

```
'Mg': 0.72, 'Al': 1.30, 'Si': 1.18, 'K': 1.38, 'Ca': 1.00, 'Sc': 0.75,
```

```
'Ti': 0.86, 'V': 0.79, 'Cr': 0.73, 'Mn': 0.67, 'Fe': 0.61, 'Co': 0.64,
```

```
'Ni': 0.55, 'Cu': 0.46, 'Zn': 0.60, 'Ga': 1.22, 'Ge': 1.22, 'As': 1.22,
```

```
'Se': 1.17, 'Kr': 1.03, 'X': 0.00}
```



# Історія розвитку уявлень про будову матерії

Так ось яка ти — молекула

В. Гайтлар, Ф. Лондон — 1927, квантово-механічна теорія  
ковалентного зв'язку (теорія молекули  $H_2$ )

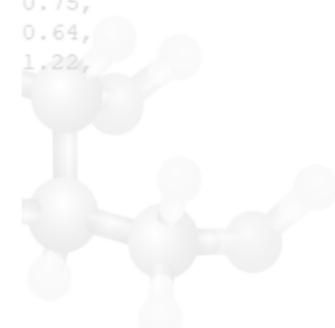
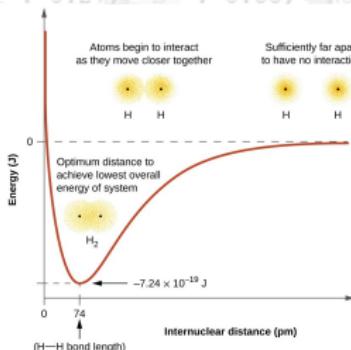
$$\Phi_{AB}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2 + 2S_{AB}^2}} [\chi_A(\vec{r}_1) \cdot \chi_B(\vec{r}_2) + \chi_B(\vec{r}_1) \cdot \chi_A(\vec{r}_2)]$$



(a)



(b)



# Історія розвитку уявлень про будову матерії

Тепер у нас є все що необхідно! Точно?

```
import sys, math
```

Поль Дірак — 1928, релятивістське рівняння руху вільного електрона (позитрона)

```
# threshold beyond average of covalent radius and the bond cutoff
bond_thresh = 1.2
```

$$i\hbar\gamma^\mu \partial_\mu \psi - mc\psi = 0$$

```
# covalent (or ionic) radii by atomic element (Angstroms) from
# "Inorganic Chemistry" 3rd ed, Housecroft, Appendix 6, pgs 1013-1014
```



«Нарешті, основні фізичні закони необхідні для побудови математичної теорії здебільшого фізики і всієї хімії, повністю відомі, і єдина складність полягає в тому, що в результаті застосування цих законів ми приходимо до дуже складних для розв'язання рівнянь»

*Dirac P.A.M. Quantum Mechanics of Many Electron Systems // Proceedings of the Royal Society A123 (1929): 713.*

# Історія квантової хімії

## Що дає розв'язок рівняння квантової механіки

Рівняння Шредінгера (Дірака) можна записати для системи, що складається з багатьох ядер і електронів (тобто для атомів, молекул, іонів, кристалів), і його розв'язок у вигляді хвильової функції.

Знаючи хвильову функцію, **в принципі**, можна визначити розподіл електричного заряду, розрахувати моменти молекули, обчислити її спектроскопічні і резонансні характеристики, описати її реакційну здатність, розрахувати зонну структуру кристала і т ощо. Для простих систем хвильові функції можна досить точно розрахувати чисельно; для систем більш складних і представляють практичний інтерес для хімії це неможливо.

$$\Psi = \Psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1, \mathbf{r}_2, \sigma_2, \dots, \mathbf{r}_N, \sigma_N; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_K),$$

де  $\mathbf{r}_i$  та  $\sigma_i$  — просторові та спінові координати електронів, відповідно,  $\mathbf{R}_\alpha$  — координати ядер,  $N$  — число електронів,  $K$  — число ядер.

Основна перешкода полягає в тому, що навіть за наявності всього двох електронів це рівняння аналітично не розв'язується, а при збільшенні їх числа складнощі зростають. Тому при розрахунках доводиться вводити різні наближення.

# Історія квантової хімії

## Що дає розв'язок рівняння квантової механіки

Рівняння Шредінгера (Дірака) можна записати для системи, що складається з багатьох ядер і електронів (тобто для атомів, молекул, іонів, кристалів), і його розв'язок у вигляді хвильової функції.

~~# threshold beyond average of covalent radii to determine bond cutoff~~  
~~bond\_threshold = 1.2~~  
 Але є одне але ... **А чи треба знати точну хвильову функцію?**

~~# covalent (or ionic) radii by atomic element (Angstroms) from~~  
~~# "inorganic chemistry handbook", housecroft, 2014~~  
~~covalent\_radii = {~~  
 Істотним обставиною при цьому виявляється принципова нерозрізненність всіх електронів молекули і як наслідок уявлення про хімічний зв'язок між атомами, про геометрію молекули, її симетрії і топології і багато інших «уявлень» про молекулу втратять сенс.

~~'Li': 1.00, 'Be': 1.02, 'B': 0.27, 'Na': 1.02,  
 'Mg': 0.72, 'Al': 1.30, 'Si': 1.18, 'K': 1.38, 'Ca': 1.00, 'Sc': 0.75,  
 'Ti': 0.86, 'V': 0.79, 'Cr': 0.73, 'Mn': 0.67, 'Fe': 0.61, 'Co': 0.64,  
 'Ni': 0.55, 'Cu': 0.46, 'Zn': 0.60, 'As': 1.22,~~  
 $\Psi = \Psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1, \mathbf{r}_2, \sigma_2, \dots, \mathbf{r}_N, \sigma_N; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_K)$ .

Всі уявлення про молекулу мають сенс тільки в рамках певних наближень, які взагалі не випливають з основних принципів (*ab initio*) квантової механіки.

# Історія квантової хімії

## Основні наближення квантової хімії

1. Наближення *Борна-Оппенгеймера*, засноване на ідеї окремого розгляду хвильових функцій, що описують стан електронів і ядер.

~~import sys  
## CONSTANTS ##~~

Більш важкі ядра рухаються набагато повільніше електронів і при описі багатьох електронних процесів можуть вважатися нерухомими. В результаті математична задача визначення електронних хвильових функцій значно спрощується. Теорія *хімічного зв'язку*, наприклад, побудована головним чином в цьому наближенні.

~~# covalent radii for atoms by Bondi (1964)  
# "Inorganic crystallographic tables"  
cov\_rads = {~~

2. Наближення *незалежних частинок* (одноелектронне наближення), в якому замість взаємодії заданого електрона з іншими електронами і ядрами розглядають його взаємодію з електричним полем молекули або кристала, усередненим за положеннями інших частинок.

Завдяки цьому наближенню проблема розрахунку хвильових функцій для складних систем зводиться до визначення одноелектронних хвильових функцій кожного електрона в середньому полі інших частинок. Сучасні прості і потужні методи квантової хімії — методи Хартрі-Фока і Кона-Шема — дозволяють розрахувати саме такі функції — атомні, молекулярні або кристалічні орбіталі.

# Історія квантової хімії

## Основні віхи в історії розвитку квантової хімії

```
import sys, math
```

```
## CONSTANTS ##
```

- 1929, Д. Хартрі, метод самоузгодженого поля для знаходження розв'язків рівняння Шредінгера для багатьох частинок.

```
# bond_threshold = 1.2
# cov_rads = 0.8
# "Inorganic Chemistry" by N. Campbell (Astronomy from the
# Appendix 6), pg. 10131014
```

• 1929, Д. Е. Леннард-Джонс, ідея про поділ всіх електронів молекули на внутрішні і валентні. Роль валентних електронів — визначають в основному хімічні властивості молекули

- 1929 – 1930, В. О. Фок — вдосконалення методу Хартрі (врахував симетрію хвильової функції).
- Д. К. Слейтер вводить функції для опису радіальної залежності атомних орбіталей, які отримали назву слейтерівських орбіталей.

# Історія квантової хімії

## Основні віхи в історії розвитку квантової хімії

- ```
import sys, math
## CONSTANTS
# threshold for bond length cutoff
bond_threshold = 1.5
# bond cutoff
# covalent radii from "Inorganic Chemistry", 5th ed., Housecroft, Appendix 6, pgs 1013-1014
# "Ne": 0.54, "O": 0.72, "S": 0.77, "Cl": 0.73, "N": 0.75, "F": 0.71,
cov_rads = {"H": 0.37, "C": 0.77, "O": 0.73, "N": 0.75, "F": 0.71,
    'P': 1.13, 'S': 0.99, 'Se': 1.03, 'Cl': 1.02, 'Br': 1.07, 'I': 1.14, 'F': 0.73, 'Mn': 0.67, 'Fe': 0.61, 'Co': 0.64, 'Ti': 0.86, 'V': 0.79, 'Cr': 0.73, 'Ga': 1.22, 'Ge': 1.22, 'As': 1.22, 'Se': 1.03, 'Xe': 0.99, 'Kr': 1.07, 'Rb': 1.14, 'Cs': 1.22, 'Fr': 1.22, 'He': 0.54, 'Ar': 0.72, 'Kr': 0.77, 'Xe': 0.73, 'Rb': 0.75, 'Cs': 0.71, 'Fr': 0.71, 'Ne': 0.54, 'O': 0.72, 'S': 0.77, 'Cl': 0.73, 'N': 0.75, 'F': 0.71, 'P': 1.13, 'S': 0.99, 'Se': 1.03, 'Cl': 1.02, 'Br': 1.07, 'I': 1.14, 'F': 0.73, 'Mn': 0.67, 'Fe': 0.61, 'Co': 0.64, 'Ti': 0.86, 'V': 0.79, 'Cr': 0.73, 'Ga': 1.22, 'Ge': 1.22, 'As': 1.22, 'Se': 1.03, 'Xe': 0.99, 'Kr': 1.07, 'Rb': 1.14, 'Cs': 1.22, 'Fr': 1.22, 'He': 0.54, 'Ar': 0.72, 'Kr': 0.77, 'Xe': 0.73, 'Rb': 0.75, 'Cs': 0.71, 'Fr': 0.71}
```
- 1931, Лайнус Полінг узагальнює результати розрахунків молекули водню Гайтлера і Лондона на багатоатомні молекули, формулюючи спінову теорію валентності.
  - 1930, Е. Хюккель розробляє простий метод молекулярних обітальей (МО) — передбачення (властивостей молекул, складніших за  $\text{H}_2$ )
  - 1932, Роберт Маллі肯 остаточно вводить поняття молекулярної обіталі як одноелектронної хвильової функції для опису електронів в молекулах.
  - 1935, Берта Свірлс, застосування рівняння Дірака в квантовій хімії (метод Дірака-Фока-Брейта).
  - 1935, Г. Г. Гельман вводить назву «Квантова хімія» [**Gelman**].
  - 1951, К. Рутаан сформулював метод Хартрі-Фока для молекулярних систем з замкнутими оболонками

# Історія квантової хімії

## Вдосконалення методів

```
import sys, math
```

- 1965, Вальтер Кон (Нобелівська премія з хімії 1998) і Лу Джей Шем — практичний метод знаходження електронної густини і енергії системи через електронну густину, що став обчислювальною основою методу функціонала густини.
- 1964, П'єр Хоенберг, Вальтер Кон (Нобелівська премія з хімії 1998) — теорія функціонала електронної густини.
- Джон Попл (Нобелівська премія з хімії 1998) — напівемпіричні квантово-хімічних методів, заснованих на наближенні нульового диференціального перекривання.
- 1970-ті, перші версії програмного комплексу GAUSSIAN. Офіційний web-сайт програми <http://gaussian.com/> — програмного пакету для розрахунку структури і властивостей молекулярних систем, що включає велику різноманітність методів обчислювальної хімії, квантової хімії, молекулярного моделювання.

# Історія квантової хімії

## Можливості квантової хімії

```
import sys, math
```

*З появою високопродуктивних комп'ютерів, квантова хімія починає ставати обчислювальною.*

```
# threshold beyond average of covalent radii to determine bond cutoff
```

**На сьогоднішній день квантова хімія дозволяє з високою точністю обчислювати:**

```
# cov_radii (for ionic) radii by atomic element (Angstroms) from
# "Inorganic Chemistry", 3rd ed., R. D. Wilen & M. M. Schlesinger, Appendix 6, pgs 1013-1014
cov_rads = {'H': 0.37, 'He': 0.73, 'N': 0.75, 'F': 0.71,
            'P': 1.0, 'Cl': 0.99, 'Br': 1.14, 'I': 1.33, 'Ar': 0.30,
            'Ne': 0.84, 'Li': 1.02, 'Be': 0.27, 'B': 0.88, 'Na': 1.02,
            'Mg': 0.87, 'Al': 0.73, 'Si': 0.75, 'Ca': 1.00, 'Sc': 0.75,
            'Ti': 0.85, 'V': 0.73, 'Cr': 0.73, 'Mn': 0.67, 'Fe': 0.61, 'Co': 0.64,
            'Ni': 0.85, 'Cu': 0.73, 'Zn': 0.73, 'Ge': 1.22, 'As': 1.22,
            'Se': 1.17, 'Kr': 1.03, 'X': 0.60}
```

- рівноважні міжядерні відстані;
- валентні кути;
- бар'єри внутрішнього обертання;
- енергії утворення і енергії дисоціації;
- частоти і ймовірності переходів;
- енергії активації реакцій;
- перерізи і константи швидкості найпростіших хімічних реакцій.

# Ядра, атоми, молекули та спектри

```
import sys, math
```

```
## CONSTANTS ##
```

```
# threshold beyond which
```

```
bond_thresh = 1.2
```

```
# covalent (or ionic)
```

```
# "Inorganic Chemist"
```

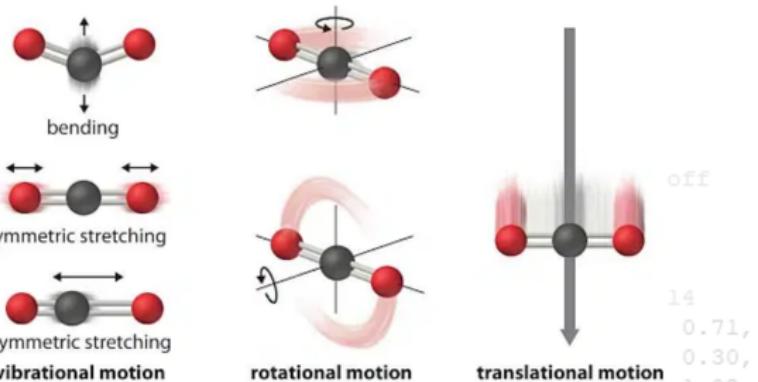
```
cov_rads = { 'H' :
```

```
    'P' : 1.10, 'S' :
```

```
    'Ne': 0.84, 'Ar':
```

```
'Mg': 0.72, 'Al': 1.30, 'Si': 1.18, 'K' : 1.38, 'Ca': 1.00, 'Sc': 0.75,
```

```
'Ti': 0.86, 'V' : 0.79, 'Cr': 0.73, 'Mn': 0.67, 'Fe': 0.61, 'Co': 0.64,
```



Діапазони енергій і часів, які відповідають електронним відповідають електронним, коливальним, обертальним і поступальним рухам молекули. Кожен із цих рухів є квантовим, тобто стаціонарні стани для цих рухів є розв'язанням якогось якогось рівняння Шредінгера.

Щоб ініціювати перехід, фотон має потрапити в резонанс із потрібним рухом молекули, тому частота/довжина хвилі фотона теж характеризує сам рух.

# Ядра, атоми, молекули та спектри

```
import sys, math
```

```
## CONSTANTS ##
```

```
# threshold beyond which a bond is considered broken
bond_thresh = 1.2
```

```
# covalent (or ionic) radius for each element
# "Inorganic Chemistry" by J. H. Moore
cov_rads = {
```

```
    'H' : 0.31, 'He' : 0.31, 'Li' : 0.32, 'Be' : 0.32, 'B' : 0.33, 'C' : 0.35,
    'N' : 0.35, 'O' : 0.35, 'F' : 0.35, 'Ne' : 0.45, 'Ar' : 0.55, 'Kr' : 0.65, 'Xe' : 0.75,
    'Mg' : 0.72, 'Al' : 0.95, 'Si' : 1.18, 'P' : 1.10, 'S' : 1.10, 'Cl' : 1.10, 'Ca' : 1.20,
```

```
'Sc' : 0.75, 'Ti' : 0.88, 'V' : 0.92, 'Cr' : 0.92, 'Mn' : 0.92, 'Fe' : 0.92, 'Co' : 0.92,
```

```
'Ni' : 0.92, 'Cu' : 0.92, 'Zn' : 0.92, 'Ga' : 0.92, 'Ge' : 0.92, 'As' : 0.92, 'Se' : 0.92,
```

```
'Br' : 0.92, 'Kr' : 0.92, 'Rb' : 1.02, 'Sr' : 1.02, 'Ba' : 1.02, 'Cs' : 1.02, 'La' : 1.02,
```

```
'Ce' : 1.02, 'Pr' : 1.02, 'Nd' : 1.02, 'Pm' : 1.02, 'Sm' : 1.02, 'Eu' : 1.02, 'Gd' : 1.02,
```

```
'Tb' : 1.02, 'Dy' : 1.02, 'Ho' : 1.02, 'Er' : 1.02, 'Tm' : 1.02, 'Yb' : 1.02, 'Lu' : 1.02,
```

```
'Hf' : 1.02, 'Ta' : 1.02, 'W' : 1.02, 'Re' : 1.02, 'Os' : 1.02, 'Ir' : 1.02, 'Pt' : 1.02,
```

```
'Au' : 1.02, 'Hg' : 1.02, 'Tl' : 1.02, 'Pb' : 1.02, 'Bi' : 1.02, 'Po' : 1.02, 'At' : 1.02,
```

```
'Fr' : 1.02, 'Ra' : 1.02, 'Ac' : 1.02, 'Th' : 1.02, 'Pa' : 1.02, 'U' : 1.02, 'Np' : 1.02,
```

```
'Pu' : 1.02, 'Am' : 1.02, 'Cm' : 1.02, 'Bk' : 1.02, 'Cf' : 1.02, 'Md' : 1.02, 'No' : 1.02,
```

```
'Nh' : 1.02, 'Fl' : 1.02, 'Mc' : 1.02, 'Ts' : 1.02, 'Nh' : 1.02, 'Mc' : 1.02, 'Ts' : 1.02,
```

```
'Nh' : 1.02, 'Mc' : 1.02, 'Ts' : 1.02, 'Nh' : 1.02, 'Mc' : 1.02, 'Ts' : 1.02, 'Nh' : 1.02,
```

```
'Nh' : 1.02, 'Mc' : 1.02, 'Ts' : 1.02, 'Nh' : 1.02, 'Mc' : 1.02, 'Ts' : 1.02, 'Nh' : 1.02,
```

```
'Nh' : 1.02, 'Mc' : 1.02, 'Ts' : 1.02, 'Nh' : 1.02, 'Mc' : 1.02, 'Ts' : 1.02, 'Nh' : 1.02,
```

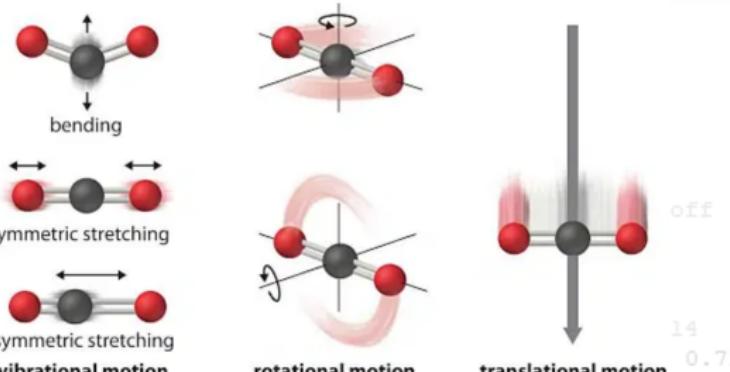
```
'Nh' : 1.02, 'Mc' : 1.02, 'Ts' : 1.02, 'Nh' : 1.02, 'Mc' : 1.02, 'Ts' : 1.02, 'Nh' : 1.02,
```

```
'Nh' : 1.02, 'Mc' : 1.02, 'Ts' : 1.02, 'Nh' : 1.02, 'Mc' : 1.02, 'Ts' : 1.02, 'Nh' : 1.02,
```

```
'Nh' : 1.02, 'Mc' : 1.02, 'Ts' : 1.02, 'Nh' : 1.02, 'Mc' : 1.02, 'Ts' : 1.02, 'Nh' : 1.02,
```

```
'Nh' : 1.02, 'Mc' : 1.02, 'Ts' : 1.02, 'Nh' : 1.02, 'Mc' : 1.02, 'Ts' : 1.02, 'Nh' : 1.02,
```

```
'Nh' : 1.02, 'Mc' : 1.02, 'Ts' : 1.02, 'Nh' : 1.02, 'Mc' : 1.02, 'Ts' : 1.02, 'Nh' : 1.02,
```



Діапазони енергій і часів, які відповідають електронним відповідають електронним, коливальним, обертальним і поступальним рухам молекули. Кожен із цих рухів є квантовим, тобто стаціонарні стани для цих рухів є розв'язанням якогось якогось рівняння Шредінгера.

Але не тільки ЕМ хвилі можуть викликати зміну станів: якщо до молекули підходять інші молекули, то вони можуть механічно віддавати/приймати енергію відповідних рухів (а для багатоатомних молекул роль інших частинок можуть виконувати інші шматки/рухи цієї ж самої молекули).

# $\gamma$ -Випромінювання

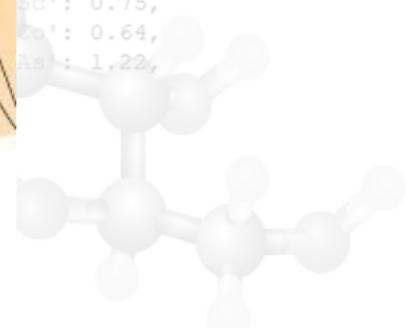
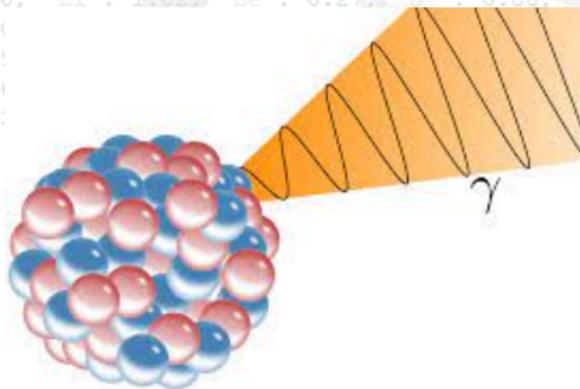
$$\nu \geq 10^{19} \text{ Гц}$$

```
import sys, math
```

```
## CONSTANTS ##
```

У цій області відбуваються здебільшого всілякі мегаенергетичні процеси, типу ядерних реакцій, випромінювання всяких космічних об'єктів і випромінювань всяких космічних об'єктів .... І це один із видів радіації, тому що у всіх хімічних сполук під час взаємодії з фотонами такої енергії відбувається вибивання електронів з різних енергетичних рівнів (іонізація).

```
'B': 1.10, 'C': 1.03,  
'Ne': 0.84, 'Ar': 1.00, 'Li': 1.02, 'Be': 0.27, 'B': 0.88, 'Na': 1.02,  
'Mg': 0.72, 'Al': 1.31  
'Ti': 0.86, 'V': 0.71  
'Ni': 0.55, 'Cu': 0.41  
'Se': 1.17, 'Kr': 1.01
```

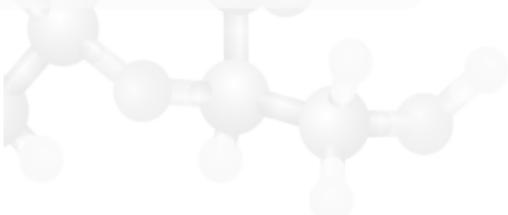
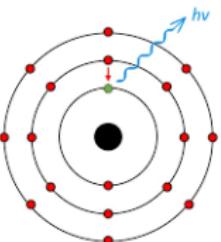


# Рентгенівське випромінювання

$$10^{19} \geq \nu \geq 10^{16} \text{ Гц.}$$

```
import sys, math
```

Ця область спектра належить до переходів остаточних електронів. Так, наприклад, рентгенівські трубки працюють за рахунок "звалювання" електронів з якого-небудь 2p-рівня в атомі на 1s. Таким чином, ця область відповідає енергіям і частотам руху остаточних електронів в атомах/молекулах. Тут електрони мають характеристичні періоди обертання навколо ядер у районі долей ангстрема. Запам'ятати довжини хвиль цього діапазону можна з таких міркувань: рентгенівські промені можуть дифрагувати на кристалічних решітках, отже, довжина хвилі повинна відповідати але довжина хвилі має бути порівнянна з довжиною міжатомних відстаней. атомних відстаней. Характеристична довжина хімічного зв'язку — це 1 Å, що і є хорошою оцінкою для довжини хвилі рентгенівських променів, що лежать у діапазоні 10 нм – 10 пм.



# Ультрафіолетове та видиме випромінювання

$$10^{16} \geq \nu \geq 0.77 \cdot 10^{15} \text{ Гц}$$

```
import sys, math
```

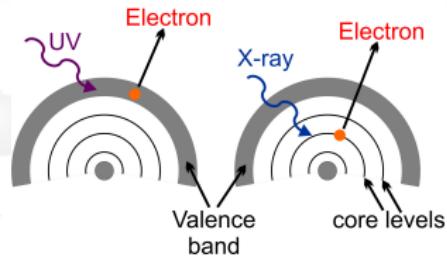
```
## CONSTANTS ##
```

$$0.77 \cdot 10^{15} \geq \nu \geq 0.43 \cdot 10^{15} \text{ Гц}$$

# threshold beyond average of covalent radii  
# bond\_thresh = 1.2

Тут уже відбуваються електронні переходи для валентних електронів. Зокрема UV/Vis спектрометри є незамінним атрибутом будь-якої органічної лабораторії. Вони дозволяють «бачити», наприклад, переходи в  $\pi$ -системах ароматичних молекул. І ми самі здатні бачити тільки в цьому вузькому шматочку всього неосяжного ЕМ-спектра, тому що процеси ізомеризації ретиналю в наших колбочках в очах ініціюються за рахунок електронного переходу, який розриває подвійний зв'язок C=C в молекулі, а це якраз валентні електрони.

Температура фотонів цього діапазону має порядок  $10^4$  К, що можна порівняти з температурою на поверхні Сонця. За наших, земних, умов, з температурами порядку  $10^2$  К, складно збудити електронні стани термічно, тобто якщо молекулу спеціально не злити і не тикати високочастотними фотонами або іншими високоенергетичними фотонами, або іншими високоенергетичними частинками, то вона перебуватиме в основному електронному стані.



# Інфрачервоне випромінювання

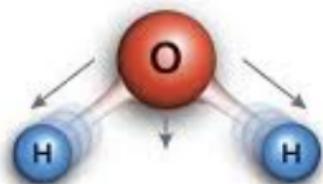
```
import sys, math
## CONSTANTS ##
```

$$0.43 \cdot 10^{15} \geq \nu \geq 0.3 \cdot 10^{12} \text{ Гц}$$

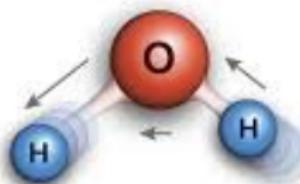
```
# threshold beyond average of covalent radii to determine bond cutoff
bond_thresh = 1.2
```

Тут, в основному, вотчина всяких коливальних переходів у молекулах. У дальній же області (за низьких частот) уже можна спостерігати обертання малих і дуже легких молекул, типу водню.

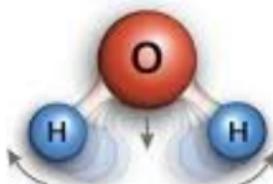
```
'H': 1.10, 'D': 1.03, 'T': 1.10, 'F': 1.13, 'Cl': 1.30,
'Ne': 0.84, 'Ar': 1.00, 'Li': 1.02, 'Be': 0.27, 'B': 0.88, 'Na': 1.02,
```



symmetric stretching



asymmetric stretching



bending

# Мікрохвильовий діапазон

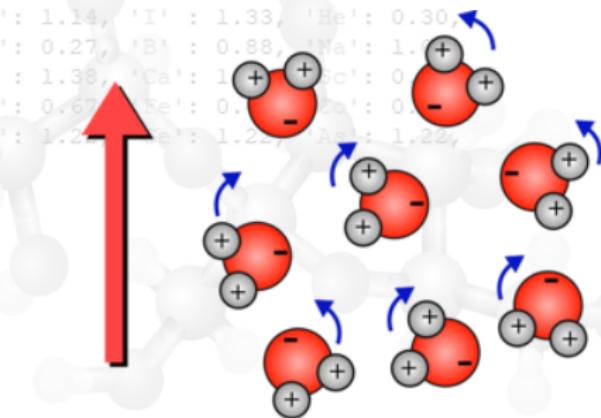
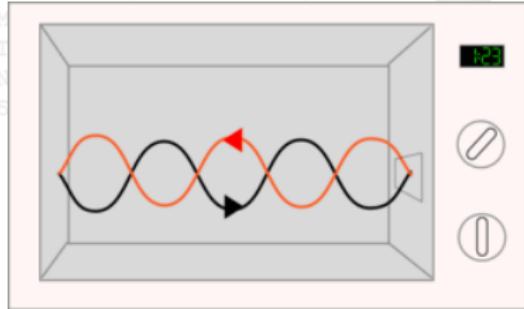
```
import sys, math
```

$$0.3 \cdot 10^{12} \geq v \geq 0.3 \cdot 10^9 \text{ Гц}$$

```
## CONSTANTS ##
```

Тут відбуваються тільки обертальні переходи вільних молекул. Чим більша, розгалуженіша, важча молекула, тим нижча частота переходу. Часи обертальних рухів мають порядок від пікосекунд до долей мікросекунд.

```
# taken from ed, Housecroft, Appendix 6, pgs 1013-1014
covRadius = { 'H': 0.72, 'C': 0.77, 'O': 0.73, 'N': 0.75, 'F': 0.71,
    'P': 1.10, 'S': 1.03, 'Cl': 0.99, 'Br': 1.14, 'I': 1.33, 'He': 0.30,
    'Ne': 0.84, 'Ar': 1.00, 'Li': 1.02, 'Be': 0.27, 'B': 0.88, 'Na': 1.05,
    'Mg': 1.38, 'Ca': 1.18, 'Cl': 0.73, 'O2': 1.20, 'N2': 0.67, 'He': 0.71,
    'Ne': 1.20, 'Ar': 1.22, 'Li': 1.22, 'Be': 1.22, 'B': 1.22,
```



# Шкала електромагнітних хвиль

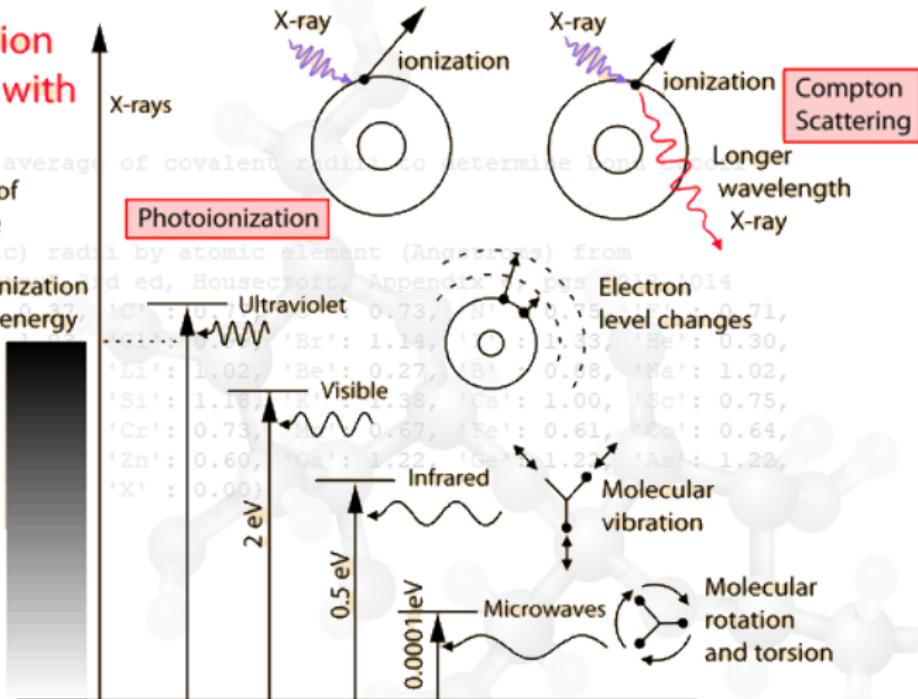
The interaction of radiation with matter.  
Click on any type of radiation for more information.

```
# cov_rads = { 'H': 0.27, 'P': 1.10, 'S': 0.37,
  'Ne': 0.59, 'Ar': 1.18, 'Kr': 1.22, 'Xe': 1.22,
  'Li': 1.02, 'Be': 0.27, 'B': 0.38, 'C': 0.73,
  'Si': 1.18, 'Cr': 0.73, 'Zn': 0.60, 'Ga': 1.22,
  'Ti': 0.89, 'Al': 1.38, 'Ca': 1.00, 'Sc': 0.75,
  'Na': 1.02, 'Mg': 0.67, 'Fe': 0.61, 'Co': 0.64,
  'Mg': 0.67, 'As': 1.22, 'Cu': 1.17 }
```

Large number of available energy states, strongly absorbed,

'Se': 1.17, 'Kr': 1.22}

Small number of available energy states, almost transparent.



# Спектроскопія

| Тип спектроскопії                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             | Переходи в молекулах.                          |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------|
| <b>Інфрачервона (ІЧ)</b><br><pre>## CONSTANTS ## # threshold beyond average of covalent radii to determine bond cutoff bond_thresh = 1.2  # covalent (or ionic) radii by atomic element (Angstroms) # "In" from Bondi, Housecroft, Appendix 6, p. 105 cov_rads = { "H": 0.37, "C": 0.77, "O": 0.73, "N": 0.75, "F": 0.71,              'B': 1.10, 'S': 1.03, 'Cl': 0.99, 'Br': 1.14, 'I': 1.30, 'P': 1.20,              'He': 0.84, 'Ar': 1.00, 'Li': 1.02, 'Be': 0.27, 'B': 0.88, 'Na': 1.02,              'Ge': 0.72, 'Al': 1.30, 'Si': 1.18, 'K': 1.38, 'Ca': 1.35, 'Mg': 1.20,              'Ti': 0.55, 'Cu': 0.46, 'Zn': 0.60, 'Ga': 1.22, 'Ge': 1.22, 'As': 1.22,              'Se': 1.17, 'Kr': 1.03, 'X': 0.00}</pre> | Коливальні та обертальні переходи в молекулах  |
| <b>Раманівська (Раман)</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | Обертальні та коливальні переходи в молекулах. |
| <b>УФ/видима (UV/Vis)</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | Електронні переходи в атомах або молекулах.    |
| <b>Електронний парамагнітний резонанс (EPR)</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               | Електронні переходи зі зміною спіна.           |
| <b>Ядерно-магнітний резонанс (ЯМР)</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | Переорієнтація ядерних магнітних моментів.     |