

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \omega^2\right) \psi(x) = \varphi.$$

сложим, что это уравнение для волновых процессов) Л. де Бройля. Тогда

$$U(x) \rightarrow \text{по де Бройлю в } \frac{c^2}{v(x)} \text{ и}$$

$$\omega \rightarrow \text{по де Бройлю в } \omega(x) = \frac{1}{h} \frac{h\nu}{\lambda}$$

$$\rightarrow \text{ по де Бройлю в } \frac{v^2(x)}{c^2} \frac{1}{h^2} \frac{m_0^2 c^4}{1-v^2/c^2} = \text{срелитв. предел } \approx \frac{m_0^2 v^2(x)}{h^2} = p^2(x)/h^2.$$

частицы в потенциальном поле  $U(x)$ :

$$\frac{p^2(x)}{2m_0} + U(x) = E \equiv \text{const} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{p^2(x)}{h^2} = \frac{2m_0}{h^2} (E - U(x)).$$

или образно, стационарные волновые связующие волны ("колебательный п. де Бройля имеет вид:

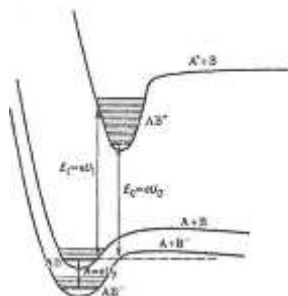
$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{2m_0}{h^2} (E - U(x))\right) \psi(x) = \varphi.$$

бывает на трёхмере тривиально:

$$\left(\Delta + \frac{2m_0}{h^2} (E - U(\vec{r}))\right) \psi(\vec{r}) = \varphi,$$

$$\Delta = (\nabla)^2, \quad \nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right).$$

и есть записывается стационарное уравнение.



Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
 ФГБОУ ВО «Ивановский государственный университет»  
 ФГБОУ ВО «Ивановский государственный химико-технологический университет»  
 ФГБОУ ВО «Ярославский государственный университет им. П.Г.Демидова»  
 Российская Академия Наук  
 ФГБУН «Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН»

Посвящается памяти профессора К.С. Краснова



# Х Всероссийская молодежная школа-конференция

## КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ: СТРУКТУРА И РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ ОРГАНИЧЕСКИХ И НЕОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ

Иваново, 23-25 марта 2022 г.

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
ФГБОУ ВО «Ивановский государственный университет»  
ФГБОУ ВО «Ивановский государственный химико-технологический  
университет»  
ФГБОУ ВО «Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова»  
Российская академия наук  
ФГБУН «Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН»

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ:  
СТРУКТУРА И РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ  
ОРГАНИЧЕСКИХ И НЕОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ**

**X Всероссийская молодежная школа-конференция**

Иваново, 23-25 марта 2022 г.

**СБОРНИК НАУЧНЫХ СТАТЕЙ**

Иваново

Издательство «Ивановский государственный университет»

2022

УДК 544.18  
ББК 24.511.2  
К 321

**Квантово-химические расчеты: структура и реакционная способность органических и неорганических молекул** : X Всероссийская молодежная школа-конференция : сборник научных статей. – Иваново, 23–25 марта 2022 г. – Иваново : Иван. гос. ун-т, 2022. – 220 с.

ISBN 978-5-7807-1385-2

Издание представляет собой сборник научных статей, представленных в рамках X Всероссийской молодежной школы-конференции, посвященных квантово-химическим расчетам молекул органических и неорганических соединений.

Рассмотрены особенности геометрического и электронного строения соединений, взаимосвязи структуры и реакционной способности.

Издание адресовано студентам, аспирантам, научным и инженерно-техническим работникам, а также преподавателям соответствующих разделов химии.

*Печатается по решению редакционно-издательского совета  
Ивановского государственного университета*

*Ответственные за выпуск:*

доктор химических наук, проф. **М. В. Клюев**  
кандидат химических наук, доц. **Т. Г. Волкова**

ISBN 978-5-7807-1385-2

© ФГБОУ ВО «Ивановский  
государственный университет», 2022

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ:  
СТРУКТУРА И РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ ОРГАНИЧЕСКИХ И  
НЕОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ**

**X Всероссийская молодежная школа-конференция**

Иваново, 23-25 марта 2022 г.

СБОРНИК НАУЧНЫХ СТАТЕЙ

Директор издательства *Л. В. Михеева*

*Издается в авторской редакции*

Подписано в печать 17.03.2022 г.

Уч.-изд. л. 12,5. Заказ № 3.

Издательство «Ивановский государственный университет»

✉ 153025 Иваново, ул. Ермака, 39 ☎ (4932) 93-43-41

E-mail: [publisher@ivanovo.ac.ru](mailto:publisher@ivanovo.ac.ru)