

и (ii) ове су преносиве са једног система на други у мер и у којој пренос остопа, расподелу и аспектисама, не промене њеном. Пошто је из ове експерименталне дајатоми и функционисања група атома могу да се преносе у вишој мери и када се то десило може се одредити дефиницијом атома и функција налик група укупних особина система. Теорија атома у молекулу у овом случају открива експериментално одређене карактеристике и адитивне допринос групе самим атомима, као што је дефиницијом за примери, енергију, електронну поларизабилност и магнетну susceptibilitet. То су атоми хемије.

На слици 6 су хрине к оје припадају овим граничним мрежама приказане задебљањима. Истевређања и једнак преглед и начин ограничавају простор који се може придружити одређеном атому у молекулу. Колико је овај међутим дан за дефинисање атома у молекулу може се видети и на слици 10 у којима је водоник који је у овом случају разграничен атомима од Li до F.

Из слике се види да је простор (а самим тим и део електрононе густине) већи око електронегативнијег атома у молекулу. Како ће изгледати 'облик' атома у молекулу зависи од суседних атома. Тиме се директно добија објашњење за преносити до прикласа атома у различитим функцијама молекула.

Такође се могу дефинисати цел и фрагменти молекула и окупаци се да појате функционисања групе по казују сличан облику различитим молекулама и у таквом фрагменту је не само укупна величина језгара, већ и величина језгара. Са тим се добија адитивни доприносди пољом моменту, молекула о којој полазиабилност, рефракцијидр.

И на крају, описани приказ дефинисања атома и атомских група у молекулу се може ајанективне по нестати са познатим Луисовим моделом и VSEPR моделом. На потпуноаналоган начин се могу дефинисати домен и који се придружују паровима атома.⁶⁷ Варијација овог приступа је анализадиференцијалне електрононе густине,⁶⁸ која се може сматрати једним од граничних хомогених делова налик е градијента електрононе густине.

За одговор на питање постављено у асловаможе се рећи да је потврди. Анализи парована хемијске густине се могу придружити дефинисати појамови који чине основу теорије о структури молекула, а то су путање, веза и атом у молекулу, с тим што се атом третира као отворени систем у молекулу.

Слика 9. Трехдимензионални приказ акупутања а (Ure) које завршавају и а критичној тачки вех и дефинишу међуатомску површину и јединствен преглед путања које постоје из исте тачке и дефинишу путање. Само се једна партикла скуп која завршава на критичној тачки и ојављује у равни приказаној на слици 6.

за анализу тачку, и а површину S(ξ) где је n(r) јединица у екстерном нормалу на површину на ξ. Други речења, површину не пресецају једна путања U(r). А то м је, као део неке већег система, сам о њи фенсистема одољан током наслектрисања и моментално зграњени у површину. На тај начин долази до упечатљивог резултата да само отворени систем о граничен површину што је довољно ајау гранични услед 'ну тог флукса' изражен у јединици (1) даје и зраз за промену дејства који стоји облика и садржаја као и онај за изоловани систем и пре тога, даје једнакостретања за опсервације су дигиталне онлине к оје редифајединица поља. Тако дефиниција отвореног система на атомском нивоу није стварно одређена физиком. Према томе, отворени систем који задовољава јединицу (1) зове сесовјединица у фени систем.

Укупна изоловани систем такође задовољава јединицу (1). Тако се једини физичким принципима одређују особине целих система и њихових атомских ајона. Особине тог постојећег атома се поклапају са оним прегледним атомима хемије; (ii) он се алативни дајући одговарајућу особину целих система

Слика 10. Слика атома и функција налик група атома као 'spacefilling' објекта - области ограничених пресецања међуатомских површина и van der Waals-ове овојине електрононе густине. Хидриди друге периодне AH, где A= Li, Be, B, C, N, O и F. Ограничени показују на промену величине и облика атома водоника од карактеристика хидрида јона у LiH до позитивно наслектрисања у HF, где је атом скрупуозно рекополовише него веелектронске густине.

Abstract
DOES QUANTUM THEORY IDENTIFY THE CHEMICAL BOND?
Ivan Juranic
Faculty of Chemistry, University of Belgrade

It is well known that chemical structure and chemical bonding are not observable. Having no quantum mechanical counterpart for a chemical bond and for chemical structure, there is no precise mode for their description and/or determination. However, analysis of the gradient of electron density, combined with the treatment of an atom in the molecule as an open system, offers an unambiguous mode for the definition of chemical bonding and of the atom in a molecule. The presentation is mostly based on the ideas of R. F. W. Bader.

Слика 11. (А) Пренонаметил група на рмални х угловодоника. Ова група остаје суштински непромењена у овој серији молекула и доприноси фиксан и зис свакој особини, укључујући и премину, енергију, електронну поларизабилност и магнетну susceptibilitet. (Б) Ајанект ивица испод а негича ограничења са своје две амидне међуатомске површине. Ова група, и осталих група које служи као прегледни истраживачки и облици, и мафиниса скуп особина и угловнаслектрисања.

⁶⁷ R. Dadda "Electron density distribution in molecule and crystal". Ed. P. Becker, Plenum Publ. Corp. 1988, 85-121.
⁶⁸ R. F. W. Bader "Accurate Chem. Rev. 18 (1985), 9-15; K. Aungmy, K. H. Claus, R. Goddard, C. Kohn "Angew. Chem. Int. Ed., 24 (1985), 257-257.