

# КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР

для специальности 1-31 04 01 Физика (по направлениям)  
направления специальности 1-31 04 01-06  
Физика (физика наноматериалов и нанотехнологий)

**Введение.** Краткий обзор основных принципов и этапов развития квантовой механики.

**Основные понятия и приближения квантовой химии.** Основные приближения теории: нерелятивистское приближение, адиабатическое приближение, орбитальное приближение. Понятие самосогласованного поля

**Неэмпирические методы.** Вывод уравнений Хартри-Фока-Рутана. Теория возмущений. Виды базисных функций Методы расчета молекулярных одно- и двух-электронных многоцентровых интегралов.

**Методы учета электронной корреляции.** Многодетерминантные волновые функции. Методы ограниченного и полного КВ. Расчет корреляционных эффектов в рамках теории возмущений.

**Полуэмпирические методы.** Метод МО ЛКАО и метод Хюккеля. Полуэмпирические методы полного и частичного пренебрежения дифференциальным перекрытием: CNDO, INDO, MNDO, AM1, PM3, ZINDO, ZINDO/S.

**Теория функционала плотности.** Основные теоремы теории функционала плотности (ТФП).

**Краткое знакомство с методом молекулярной механики.**

**Изучение программных пакетов HyperChem, MOPAC, GAMESS.** Ввод данных. Оптимизация геометрии, расчет энергетических и спектральных характеристик.

## Перечень основной литературы

1. Заградник Р., Полак Р. Основы квантовой химии. М.: Мир, 1979.
2. Фудзинага С. Метод молекулярных орбиталей. М.: Мир, 1983.
3. Мак-Вини Р., Сатклиф Б., Квантовая механика молекул. М.: Мир, 1972.
4. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. Ростов на Дону: Феникс, 1997.
5. Цюлик П. Квантовая химия. М.: Мир, 1976.
6. Счастнев П.В. Теория электронных оболочек молекул. Новосибирск: Изд-во НГУ, 1973.

## Перечень дополнительной литературы

1. Cramer C.J., Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models. Chichester: John Wiley & Sons, 2002.
2. Т. Кларк. Компьютерная химия. – М.: Мир, 1990.-382 с.
3. Сигал Дж. Полуэмпирические методы расчета электронной структуры. М.: Мир, 1980, Т.1.-327 с., Т.2. – 371 с.