

## Программа курса «Квантовая химия», 311 группа, весна 2004.

1. Молекулярное уравнение Шредингера. Выделение переменных центра масс и отделение вращения системы как целого.
2. Адиабатическое приближение. Электронное и ядерное уравнения. Электронная плотность. Потенциальная поверхность.
3. Одноэлектронное приближение. Представление волновой функции в виде определителя Слэтера. Нормировка определителя Слэтера. Функционал энергии в одноэлектронном приближении.
4. Уравнения Хартри-Фока. Кулоновский и обменный операторы. Неограниченный и ограниченный варианты метода Хартри-Фока. Проектирование по спину и спин-спроектированный метод Хартри-Фока. Связь орбитальных энергий с полной электронной энергией в приближении Хартри-Фока.
5. Уравнения Хартри-Фока-Роотхаана. Выражение для энергии. Матрица зарядов на атомах и порядков связей. Типы базисных функций, используемых в молекулярных расчётах. Орбитали Слэтера и гауссовы орбитали. Диффузные и поляризованные орбитали. Эквивалентные и гибридные орбитали.
6. Теорема Купманса. Адиабатическая и вертикальная энергии (потенциалы) ионизации.
7. Полуэмпирические методы квантовой химии. Приближение нулевого дифференциального перекрывания. Различные полуэмпирические методы на основе приближения ZNDO.
8. Расширенный метод Хюккеля.  $\pi$ -электронное приближение. Простой метод Хюккеля. Заселённости по Малликену. Альтернантные системы.
9. Метод конфигурационного взаимодействия. Правила Слэтера для вычисления матричных элементов. Многоконфигурационный метод самосогласованного поля.
10. Метод функционала плотности. Матрицы плотности первого и второго порядков.
11. Группы симметрии молекул. Классы эквивалентных элементов. Представления групп. Неприводимые представления. Характеры представлений. Свойства характеров неприводимых представлений. Проекторы на подпространства, преобразующиеся по неприводимым представлениям.
12. Точечные группы симметрии. Классификация точечных групп и обозначения неприводимых представлений.
13. Прямое произведение представлений. Теорема Вигнера-Эккарта. Правило отбора для вероятностей переходов.
14. Сохранение орбитальной симметрии. Правило непересечения. Правило Хунда о максимальной мультиплетности.
15. Теорема Яна-Теллера.
16. Теория кристаллического поля.