

Методы квантовой химии (32 ч)

Адиабатическое приближение. 2ч

Разделение электронных и ядерных переменных.

Адиабатическое приближение. Поверхности потенциальной энергии.

Электронная волновая функция (ВФ). "Взаимодействие" электронных ВФ.

Уравнения Хартри-Фока. 4ч

Перестановочные свойства симметрии электронных ВФ. Детерминанты Слетера.

Матричные элементы со слейтеровскими детерминантами. Однодетерминантное приближение. Уравнения Хартри-Фока. Метод самосогласованного поля (ССП).

Виртуальные орбитали. Теорема Купманса. Теорема Бриллюэна. Разложение молекулярных орбиталей по атомному базису (метод МОЛКАО). Уравнения Хартри-Фока-Рутана для закрытых оболочек.

Теория Возмущений. 8ч

Теория Возмущений Рэлея-Шредингера. Модельное пространство. Модельная волновая функция. Волновой оператор. Корреляционный оператор. Обобщенные уравнения Блоха. Эффективный гамильтониан. Ряд теории возмущений.

Многочастичная теория возмущений для случая замкнутых оболочек. Вторичное квантование. Нормальная форма оператора. Частично-дырочный формализм. Теорема Вика. Диаграммная техника. Правила Голдстоуна. Теорема о связанных диаграммах.

Теория возмущений Бриллюэна-Вигнера. Размерная согласованность методов расчета.

Метод наложения конфигураций. 2ч

Метод наложения конфигураций на мульти-ссылочном модельном пространстве.

T=0 поправка. Поправка Дэвидсона.

Метод многоконfigurационного самосогласованного поля. 4ч

Метод полного наложения конфигураций в пространстве активных орбиталей.

Обобщенная теорема Бриллюэна. Редуцированная матрица плотности.

Метода связанных кластеров. 4ч

Теорема о соединенных диаграммах для систем с замкнутыми оболочками.

Экспоненциальное представление электронной ВФ. Размерная согласованность метода связанных кластеров. Динамические корреляции, нединамические корреляции, "статические" корреляции. Особенности релятивистского варианта метода СК.

Атомные базисные наборы. 2ч

Орбитали слейтеровского типа. Орбитали гауссовского типа. Сжатие базиса.

Равномерно- и неравномерно-сбалансированные атомные базисы. Базис натуральных атомных орбиталей. Корреляционно-согласованные базисы. Обобщенно-корреляционные базисы.

"Эффективные релятивистские гамильтонианы". 6ч.

Современные квазирелятивистские (двухкомпонентные) модели: преобразование Фолди-Вайтхаузена и Дугласа-Кролла. (Прямая теория возмущений.)
Теория метода релятивистского псевдопотенциала: потенциал Фудзинаги (AIMPs: Ab initio model potentials), полулокальные (включая ПП Абаренкова-Хейне) и сепарабельные ПП. Согласованные-по-форме (“сохраняющие норму”) РЭПО и современные формулировки (обобщения).

Рекомендованная литература

1. Р. Мак-Вини, Б.Сатклифф, *Квантовая механика молекул*. М.: Мир, 1972.
2. И.В.Абаренков, В.Ф.Братцев, А.В.Тулуб, *Начала квантовой химии*. М.: Высшая школа, 1989.
3. Н.Ф.Степанов, *Квантовая механика и квантовая химия*. М.: Мир, 2001.
4. I. Lindgren, J. Morrison, *Atomic Many-Body Theory*. New York: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1982.
5. Josef Paldus, *Coupled Cluster Theory*. New York: in *Methods in Computational Molecular Physics*, Edited by Stephen Wilson and Geerd H.F. Dierksen, Plenum Press, 1992.
6. А.В. Зайцевский, *Релятивистская теория электронного строения молекул*, М.: 2005