

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	6
-------------------	---

Глава 1

Методологические основания квантовой теории молекул	13
---	----

1.1. Принцип дополнительности	14
-------------------------------------	----

1.2. Молекулярные модели	19
--------------------------------	----

1.3. Обратные задачи	23
----------------------------	----

1.4. Полуэмпирика и <i>ab initio</i>	30
--	----

Литература	40
------------------	----

Глава 2

Базовые положения квантовой теории строения молекул	41
---	----

2.1. Разделение движений при постановке задачи о расчете уровней энергии молекул	43
---	----

2.2. Матричные уравнения в квантовой теории молекул	53
---	----

2.3. Адиабатическое приближение	62
---------------------------------------	----

2.4. Обобщенный электронно-колебательный гамильтониан	68
---	----

2.5. Атомные орбитали. Гибридизация	76
---	----

2.6. Принцип Паули и система многих частиц	82
--	----

2.7. Силы в молекулах. Теорема Гельмана—Фейнмана	90
--	----

2.8. Химические связи	98
-----------------------------	----

Литература	117
------------------	-----

Глава 3

Принципы решения чисто электронной задачи	119
---	-----

3.1. Приближение линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО)	119
--	-----

3.2. Приближение невзаимодействующих электронов	126
---	-----



3.3. Элементы симметрии многоатомных молекул	137
3.4. Симметризованные ЛКАО	142
3.5. Метод наложения конфигураций	156
3.6. Спиновые вырождения. Мультиплеты	165
3.7. Метод самосогласованного поля	172
3.8. Приближенные выражения для матричных элементов оператора Хартри—Фока. Возможность построения полуэмпирической теории электронных оболочек	183
<i>Литература</i>	192

Глава 4

Квантовая химия и молекулярная спектроскопия	193
4.1. Взаимодействие электромагнитного поля с молекулами	193
4.2. Значение расчетов молекулярных спектров и общие принципы таких расчетов	202
4.3. Матричные элементы для чисто электронных переходов	210
4.4. Колебательные уровни энергии и систематика переходов	214
4.5. Симметрия колебаний многоатомных молекул	223
4.6. Выбор естественных колебательных координат	225
4.7. Выражение кинетической энергии в естественных колебательных координатах и кинематические коэффициенты	227
4.8. Обратные спектральные задачи	233
4.9. Вычисление матричного элемента для оптического перехода между электронно-колебательными состояниями молекул при сильном различии комбинирующих геометрических структур	239
4.10. Параметрический подход для расчетов электронно-колебательных спектров	243
4.11. Расчеты интенсивностей полос поглощения в ИК-спектрах методами Хартри—Фока (<i>ab initio</i>) и функционала плотности	251
4.12. Метод расчета динамических электронно-колебательных спектров многоатомных молекул	257
<i>Литература</i>	265



Глава 5

Физическая теория процессов в молекулярных объектах

и фотохимия	266
5.1. Характеристики процессов в микромире	266
5.2. Химические превращения и физика переходных состояний	274
5.3. Кинетические уравнения для многоизомерной задачи	284
Литература	296

Приложение

Принципы генерации молекулярных структур	297
--	-----

Литература	306
------------------	-----

Заключение	307
------------------	-----

Рекомендуемая дополнительная литература	309
---	-----