

ПОСТАНОВКА КВАНТОВЫХ ЗАДАЧ В ТЕОРИИ СТРОЕНИЯ И СВОЙСТВ МОЛЕКУЛ

Л.А. Грибов

Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН

Базовые модели молекулярных объектов и их математические отображения. Брутто-формула и общее уравнение Шредингера. Теорема Жислина. Проблема структурной недоопределенности задачи.

Структурная формула, матрица смежности и матричная квантовая теория. Проблема матричных элементов. Составляющие полной энергии и конкретизация задачи.

Традиционный подход. Классическое условие стационарности – равенство сил ядерно-ядерного отталкивания и электронно-ядерного притяжения. Теорема Фейнмана и анализ алгоритма решения общей задачи об электронно-колебательных состояниях молекулярного объекта. Модели потенциальных поверхностей. Расширение круга решаемых задач и нарастание многообразия их постановки.

Введение априорных ограничений на движения ядер с учетом их «квантовой размазанности». Новые уравнения для общей электронно-колебательной задачи. «Колебательный вклад» в электронную составляющую. Матричные элементы для оптических переходов.

Принцип дополнительности. Гайзенберг и Шредингер, Ньютон и Лагранж – поиск «золотой середины». Множественность постановок задач. *Ab initio* и полуэмпирика.

Проблема химических реакций. Критика общепринятых моделей. Линейная комбинация функций подструктур. Безызлучательные переходы, резонансы и миграция волновых пакетов. Вероятности реакций, матрицы смежности и траектории реакций.

Глобальное направление – от фундаментального знания к инженерному умению!