КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА И КОЛЕБАТЕЛЬНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ: НОВЫЕ РУБЕЖИ И НОВЫЕ ПРОБЛЕМЫ?

Г.М. Курамшина

Кафедра физической химии Химического факультета

МГУ имени М.В.Ломоносова

Современную химию трудно представить без квантовохимических расчетов. Квантовомеханические методы, основанные на приближении *ab initio*, а также методы, учитывающие корреляцию электронов в различных приближениях, часто демонстрируют вполне удовлетворительное согласие с известными структурными и спектроскопическими данными, а также данными, полученными другими физико-химическими методами. По сути дела эти методы представляют своего рода дополнительный инструмент научных исследований, поскольку позволяют одновременно определить весь набор молекулярных характеристик, что невозможно сделать ни одним экспериментальным методом, а для некоторых случаев, например, для малых короткоживущих частиц, часто являются единственным источником информации об их строении и реакционной способности.

Широкое распространение теоретических расчетов, в основном, объясняется бурным прогрессом вычислительной техники, в то время как в развитии идей, лежащих в основе квантовохимических программных комплексов и вычислительных алгоритмов, используемых в них, такого прогресса, в целом, не наблюдается. В докладе предполагается обсудить достижения квантовой химии при решении задач строения молекул и современной колебательной спектроскопии и проблемы, возникающие в таких приложениях.