

# Программа курса “Квантовая химия”

## 1. ФИО автора курса

- Тихонов Денис Сергеевич
- Фрейдзон Александра Яковлевна

## 2. Краткая автобиография

- Тихонов Денис Сергеевич (к.х.н., специальность 02.00.04 - физическая химия): Окончил Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова (2009-2014 – специалитет, 2014-2017 – аспирантура). Работал в Университете Билефельда (2014-2016, Билефельд, Германия), МГУ им. М.В. Ломоносова (2017-2018, Москва), ООО “Геосплит” (резидент Сколково, 2017-2018). С 2018-го года работает в Немецком синхротронном центре DESY (Гамбург, Германия).
- Фрейдзон Александра Яковлевна (к.х.н., специальность 02.00.04 - физическая химия): Окончила Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова (1989-1994 – специалитет), работала в Центре Фотохимии РАН (1996-2022) и НИЯУ МИФИ (с 2015). С 2022 г. работает в Вейцмановском Институте (Реховот, Израиль).

## 3. Название курса

Квантовая химия

## 4. Краткое описание курса

Курс посвящён квантовой химии: методам расчёта электронных состояний молекул, и спектральных характеристик молекулярных систем. В курсе будет дан обзор современных методов вычислительной химии. Помимо лекций, будут также семинары и практические занятия.

## 5. Полная программа курса (с указанием основных тем, числа планируемых лекций, семинаров и прочих вариантов учебной работы, а также информация об итоговом экзамене)

В курсе будут рассмотрены следующие темы.

- Основы квантовой механики. Квантовое состояние, операторы квантово-механических наблюдаемых, уравнение Шрёдингера.
- Приближение Борна-Оппенгеймера, разделение электронных и ядерных степеней свободы, поверхности потенциальной энергии.
- Простейшая модель химической связи. Приближение МО ЛКАО.
- Симметрия волновой функции для фермионов. Определитель Слейтера.
- Метод Хартри-Фока.
- Пост-Хартри-Фоковские методы: теория возмущений Мёллера-Плессета (MP), конфигурационное взаимодействие (CI), метод связанных кластеров (CC).
- Метод функционала плотности (DFT). Теоремы Хоэнберга-Кона, метод Кона-Шема, лестница Якова-Пердью.
- Мультиконфигурационные методы. Статическая и динамическая электронная корреляция.
- Нековалентные взаимодействия.
- Базисные наборы. Эффективные основные потенциалы (ECP).
- Полуэмпирические методы, силовые поля, QM/MM.
- Континуальные модели учёта растворителя.
- Расчёт спектров поглощения/испускания. TD-DFT.
- Приближение жёсткий ротатор-гармонический осциллятор.
- Термохимические расчёты.
- Расчёт скоростей реакции.

- Фотохимические и фотофизические процессы.
- Перенос энергии в молекулярных системах и молекулярная фотоника.
- Перенос заряда и молекулярная электроника.
- Нетривиальная спектроскопия (многофотонные, нестационарные, когерентные процессы).

Планируется 12 лекций и 10 семинаров и практических занятий. Итоговый экзамен будет в форме расчётного проекта на заданную тему, оформленного в письменном виде и защищаемого в формате доклада.

## 6. Пререквизиты к слушателям

Для успешного прохождения курса, необходимо хотя бы минимальное знание следующих дисциплин.

- Некоторых разделов высшей математики: линейная алгебра, математический анализ, дифференциальные уравнения.
- Общая физика (механика, электродинамика, молекулярная физика/термодинамика).
- Уверенное пользование компьютером (в т.ч. работа в командной строке).

Приветствуется также знание следующих дисциплин.

- Теоретическая механика.
- Квантовая механика.
- Статистическая термодинамика.
- Linux.

## 7. Список литературы

- Ю.В. Новаковская, «Молекулярные системы: теория строения и взаимодействия с излучением» // М.: УРСС (2004)
- Ю.В. Новаковская, ч. II «Квантовые состояния молекул» // М.: УРСС (2004).
- Барановский В.И., «Квантовая механика и квантовая химия» // М: «Академия» (2008).
- F. Jensen, "Introduction to Computational Chemistry" // John Wiley & Sons, Inc (2007).
- C. Cramer, "Essentials of Computational Chemistry" // John Wiley & Sons, Inc (2004).
- Степанов Н.Ф., Пупышев В.И., «Квантовая механика молекул и квантовая химия» // М.: изд-во МГУ (1991)
- Тихонов Д.С., "Современная теоретическая химия в современном изложении" // М.: УРСС (2022)