

*Тематический раздел:* Квантовая химия.  
*Подраздел:* Квантово-химические алгоритмы.

**Полная исследовательская публикация**

*Регистрационный код публикации:* 9-15-1-5

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “*Бутлеровские чтения*”. <http://butlerov.com/readings/>  
Поступила в редакцию 10 января 2009 г. УДК 543.539.1:541.

## **О некоторых методических вопросах постановки задач в квантовой теории молекул**

© **Грибов Лев Александрович**

*Лаборатория молекулярного моделирования и спектроскопии. Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН. Ул. Косыгина, 19. ГСП-1, г. Москва В-334, 119991. Россия.*

*Тел.: (495) 137-41-47. E-mail: gribov@geokhi.ru*

**Ключевые слова:** *уравнение Шредингера, матричный формализм, методология квантовой теории.*

### **Аннотация**

Рассмотрен вопрос о переходе от уравнения Шредингера (операторная квантовая механика) к матричному формализму при применении неортонормированных базисов, не удовлетворяющих требованиям полноты.