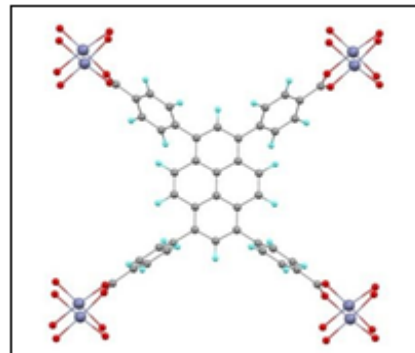


Методы квантовой химии/Methods of quantum chemistry

Лекторы:

Роман Полозков



Язык:

English

Трудоемкость:

6 з.е.

Форма контроля:

Экзамен/Exam

Образовательная программа:

Квантовые материалы

1; 3 семестр

Нанофотоника

1; 3 семестр

Гибридные материалы

1; 3 семестр

Компьютерное моделирование квантовых и нанофотонных систем

1; 3 семестр

Пререквизиты:

Специальные разделы квантовой механики

Квантовая механика

Лекции (ак.час)*	Практические занятия (ак.час)	Лабораторные занятия (ак.час)
28	28	
*1 академический час = 45 минутам		

The course contains the basic concept and general methods of quantum-mechanical modeling of nanosystems. Practical lessons are devoted to the application of modern software packages, such as "FireFly (PC GAMESS)", "GAUSSIAN", "QUANTUM-ESPRESSO", "GPAW" to modeling of the optimum geometry, electronic structure and optical response of periodic and non-periodic systems.

In particular, the course can be divided into the following parts:

1. Modeling of many-electron atoms structure.
2. Modeling of molecular systems.
3. Realization of density functional theory for computation of optimal geometry and electronic structures of periodic and non-periodic systems.
4. Time-dependent density functional theory and their application to calculation of optical response of periodic and non-periodic systems.
5. The two-particle Green's function. The two-particle vertex. Hedin's equations. GW approximation. Bethe-Salpeter equation.
6. Practical training on the basic techniques of the modern computer packages of quantum-mechanical modelling: "FireFly (PC GAMESS)", "GAUSSIAN", "QUANTUM-ESPRESSO", "GPAW".

Курс содержит основные концепции и общие методы компьютерного квантово-механического моделирования наносистем. Практические занятия посвящены применениям современных пакетов программ, таких как "FireFly (PC GAMESS)", "GAUSSIAN", "QUANTUM-ESPRESSO", "GPAW" для моделирования оптимальной геометрии, электронной структуры и оптического отклика периодических и непериодических систем.

В частности курс содержит следующие крупные разделы:

1. Моделирование строения многоэлектронных атомов (электронная теория строения атомов, метод Хартри-Фока, атомные орбитали, теория функционала плотности).
2. Моделирование молекулярных систем (теория химической связи, приближение Борна-Оппенгеймера, метод валентных связей, метод молекулярных орбиталей).
3. Реализация теории функционала плотности для расчета оптимальной геометрии и электронной структуры периодических и непериодических систем.
4. Нестационарная теория функционала плотности и ее применение для расчета оптического отклика периодических и непериодических систем.

5. Двухчастичная функция Грина. Уравнения Хедина. GW приближение. Уравнение Бете-Солпитера.
6. Практические занятия по основным приемам работы с современными пакетами компьютерного квантово-механического моделирования: "FireFly (PC GAMESS)", "GAUSSIAN", "QUANTUM-ESPRESSO", "GPAW".

Содержание курса

1 semester/1 семестр

Methods of quantum chemistry/Методы квантовой химии

Структура курса

Topic	Lectiions (ac.h.)	Seminars (ac.h.)
1. Introduction. Basics of quantum many body theory (Hartree-Fock approximation and the density functional theory).	2	
2. Modeling of molecular systems (The Hukel molecular orbital theory, Born-Oppenheimer approximation, valence bond method, molecular orbital method).	4	
3. Realization of density functional theory for computation of optimal geometry and electronic structures of atomic and molecular systems.	4	
4. The calculation of optimized geometry and electronic structure of atomic and molecular systems with use of atomic orbitals basis set – application of FireFly quantum-mechanical modeling package.		6
5. Realization of density functional theory for computation of optimal geometry, electronic structures, density of states and band structure of periodic systems with use of plane wave basis set.	10	
6. The calculation of optimal geometry, electronic structures, density of states and band structure of periodic systems with use of plane wave basis set – application of QUANTUM ESPRESSO quantum-mechanical modeling package with use of GUI BURAI.		4
7. The calculation of optimal geometry, electronic structures, density of states and band structure of periodic systems with use of plane wave basis set – application of QUANTUM ESPRESSO quantum-mechanical modeling package with use GUI QUANTUM VITAS.		6
8. The time-dependent density functional theory and their application to calculation of optical response of periodic and non-periodic systems.	4	
9. The calculation of optical response of periodic systems – application QUANTUM ESPRESSO quantum-mechanical modeling package with use GUI QUANTUM VITAS.		6
10. The two-particle Green's function. The two-particle vertex. Hedin's equations. GW approximation. Bethe-Salpeter equation.	4	
11. Realization of GW approach for periodic systems – application QUANTUM ESPRESSO quantum-mechanical modeling package.		6
Разделы	Лекции (ак.ч.)	Практика (ак.ч.)
1. Введение. Основы квантовой теории многих тел (метод Хартри-Фока, теория функционала плотности).	2	
2. Моделирование молекулярных систем (теория химической связи, приближение Борна-Оппенгеймера, метод валентных связей, метод молекулярных орбиталей).	4	
3. Реализация теории функционала плотности для расчета оптимальной геометрии и электронной структуры атомных и молекулярных систем.	4	
4. Расчет оптимальной геометрии и электронной структуры атомных и молекулярных систем с использованием базиса атомных орбиталей – применение пакета FireFly.		6
5. Реализация теории функционала плотности для расчета оптимальной геометрии, электронной структуры, плотности состояний, зонной структуры периодических систем с использованием базиса плоских волн.	10	
6. Расчет оптимальной геометрии, электронной структуры, плотности состояний, зонной структуры периодических систем с использованием базиса плоских волн – применение пакета QUANTUM ESPRESSO с использованием GUI BURAI.		4
7. Расчет оптимальной геометрии, электронной структуры, плотности состояний, зонной структуры периодических систем с использованием базиса плоских волн – применение пакета QUANTUM ESPRESSO с использованием GUI QUANTUM VITAS.		6

8. Нестационарная теория функционала плотности и ее применение для расчета оптического отклика периодических и непериодических систем.	4	
9. Расчет оптического отклика периодических систем - применение пакета QUANTUM ESPRESSO с использованием GUI QUANTUM VITAS.		6
10. Двухчастичная функция Грина. Уравнения Хедина. GW приближение. Уравнение Бете-Солпитера.	4	
11. Применение GW приближения для периодических систем с использованием базиса плоских волн - применение пакета QUANTUM ESPRESSO.		6

Рекомендуемые ресурсы

Основные:

1. K.I. Ramachandran, G. Deepa, K. Namboori. Computational Chemistry and Molecular Modeling. «Springer», 2008.
2. И.М.Ибрагимов, А.Н. Ковшов, Ю.Ф. Назаров. Основы компьютерного моделирования наносистем. Лань. 2010.
3. Л. Цюликке. Квантовая химия. «Мир», М. 1976.
4. Р.Маттук, Фейнмановские диаграммы в проблеме многих тел. «Мир», М. 1969.
5. С. Реймс, Теория многоэлектронных систем, «Мир», М. 1976.
6. G.D. Mahan, Many Particle Physics, 2000.
7. P. Coleman, Introduction to Many-Body Physics, Cambridge University Press, 2015

Дополнительные:

1. I.Lindgren, J.Morrison. Atomic many-body theory. Springer. 1982.
2. A.F.Fetter, J.D.Walecka. Quantum theory of many-particle systems. McGraw Hill Book Company. 1971.
3. Дж. Слэтер. Электронная структура молекул. «Мир», М. 1965 г.
4. H. Bruus, K. Flensberg, Many-body quantum theory in condensed matter physics, 2002
5. Д.Пайнс. Проблема многих тел. «Иностранная литература», М.1963.
6. Теория неоднородного электронного газа. Под ред. С.Лундквиста и Н.Марча. «Мир», М. 1987.
7. Д.Таулес. Квантовая механика систем многих частиц. «Мир», М. 1975

Политика оценивания

Grading policy: two intermediate tests (in the middle of the semester and at the end) in the form of calculation tasks and an exam in the form of a presentation based on the results of the combined calculation task.

Как оценивается успеваемость по курсу: два промежуточных зачета (в середине семестра и в конце) в виде расчетных заданий и экзамен в виде презентации по результатам объединенного расчетного задания.

Тип самостоятельных заданий

See supplementary materials attached
См. приложенные материалы