#  Описание курса ФТФ Университета ИТМО / Syllabus of course of Physics and Engineering Department ITMO University

|  |
| --- |
| pic1.jpg |

1.Название: Методы квантовой химии

Course title: Methods of quantum chemistry

2. Лектор: Роман Полозков

Ассистенты:

Lecturer: Roman Polozkov

Assistants:

3. Краткая аннотация (500-700 символов, на простом и доступном языке):

Курс содержит основные концепции и общие методы компьютерного квантово-механического моделирования наносистем. Практические занятия посвящены применениям современных пакетов программ, таких как “PC GAMESS”, “GAUSSIAN”, “HYPER CHEM”, “QUANTUM-ESPRESSO”, “GPAW”, “MOPACK”, “MERCURY” 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. Практические занятия по основным приемам работы с современными пакетами компьютерного квантово-механического моделирования: “PC GAMESS”, “GAUSSIAN”, “HYPER CHEM”, “QUANTUM-ESPRESSO”, “GPAW”, “MOPACK”, “MERCURY”.

Short annotation (500-700 characters, in plain and simple language):

*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 “PC GAMESS”, “GAUSSIAN”, “HYPER CHEM”, “QUANTUM-ESPRESSO”, “GPAW”, “MOPACK”, “MERCURY” 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. Practical training on the basic techniques of the modern computer packages of quantum-mechanical modeling: “PC GAMESS”, “GAUSSIAN”, “HYPER CHEM”, “QUANTUM-ESPRESSO”, “GPAW”, “MOPACK”, “MERCURY”.*

5. Название программы и семестр: **Нанофотоника и метаматериалы/Квантовые материалы, второй семестр**

Study program and semester**: Nanophotonics and metamaterials/ quantum materials, 2nd semester.**

6. Детальное описание курса с разбиением по лекциям/семинарам/практикам:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | Тема | Тип занятий |
| 1 | Введение. Системы невзаимодействующих частиц | Лекция  |
| 2 | Моделирование строения многоэлектронных атомов (электронная теория строения атомов, метод Хартри-Фока, атомные орбитали, теория функционала плотности). | Лекция (3)  |
| 3 | Моделирование молекулярных систем (теория химической связи, приближение Борна-Оппенгеймера, метод валентных связей, метод молекулярных орбиталей). | Лекция (4)  |
| 4 | Реализация теории функционала плотности для расчета оптимальной геометрии и электронной структуры периодических и непериодических систем. | Лекция (4) |
| 5 | Нестационарная теория функционала плотности и ее применение для расчета оптического отклика периодических и непериодических систем. | Лекция (4) |
| 6 | Практические занятия по основным приемам работы с современными пакетами компьютерного квантово-механического моделирования: “PC GAMESS”, “GAUSSIAN”, “HYPER CHEM”, “QUANTUM-ESPRESSO”, “GPAW”, “MOPACK”, “MERCURY”. | Cеминар(16) |

Detailed content and structure with sectioning of lectures/seminars:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | Topic | Class type |
| 1 | Introduction. Systems of independent particles: bosons and fermions, and their statistic. | Lecture |
| 2 | Modeling of many-electron atoms structure. | Lecture(3) |
| 3 | Modeling of molecular systems | Lecture(4) |
| 4 | Realization of density functional theory for computation of optimal geometry and electronic structures of periodic and non-periodic systems. | Lecture(4) |
| 5 | Time-dependent density functional theory and their application to calculation of optical response of periodic and non-periodic systems. | Lecture(4)  |
| 6 | Practical training on the basic techniques of the modern computer packages of quantum-mechanical modeling: “PC GAMESS”, “GAUSSIAN”, “HYPER CHEM”, “QUANTUM-ESPRESSO”, “GPAW”, “MOPACK”, “MERCURY”. | Seminar(16) |

7. Рекомендованная литература:

*Основная*

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. Цюлике. 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

*Дополнительная*

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

8. Предварительно пройденные курсы, необходимые для изучения предмета:

Course prerequisites: quantum mechanics (standard two-semester course)

9. Тип самостоятельных заданий (пожалуйста, приложите также несколько примеров):

Assignments (please, attach a couple of examples): attached.

10. Как оценивается успеваемость по курсу:

Grading policy:

Final grade is based solely on the final exam. Solution of the homework problems is strongly recommended to be able to solve the problems at the exam.

11. Дополнительные комментарии:

Additional comments: