

Кафедра квантовой механики.

Магистратура: 5 курс 9 и 10 семестры.

Программа лекций по спецкурсу ДНМ.07

"Дополнительные главы квантовой механики" (80 ч.).

(лектор: к.ф.-м.н., доцент ТУПИЦЫН Илья Игоревич)

Глава I. Одноэлектронное приближение в многоэлектронной теории.

1. Одноэлектронное приближение.
2. Метод Хартри.
3. Теорема Купменса в методе Хартри.
4. Выражение для полной энергии в однодетерминантном методе Хартри-Фока.
5. Уравнения Хартри-Фока в отсутствие симметрии.
6. Теорема Купменса в методе Хартри-Фока.
7. Общее соотношение Гельмана-Фейнмана и соотношение Гельмана-Фейнмана в методе Хартри-Фока.
8. Общая теорема вириала и теорема вириала в методе Хартри-Фока.
9. Теорема Бриллюэна.

Глава II. Симметрия и метод Хартри-Фока.

1. Построение базисов неприводимых представлений. Техника операторов проектирования.
2. Понятие электронной оболочки. Открытые и замкнутые оболочки. Электронная конфигурация.
3. Общая формулировка ограниченного метода Хартри-Фока. Случай замкнутых и открытых оболочек.
4. Ограниченный по спину метод Хартри-Фока.
5. Одночастичная матрица плотности и одноэлектронная плотность. Бесспиновая одночастичная матрица плотности. Свойства симметрии одночастичной матрицы плотности.
6. Неограниченный метод Хартри-Фока. Спин-неограниченный (спин-поляризованный) метод Хартри-Фока. Примеры.

Глава III. Приближение центрального поля и метод Хартри-Фока.

1. Приближение центрального поля. Атомные термы.
2. Построение многодетерминантных собственных функций операторов квадратов угловых моментов: S, L, J .
3. Выражение для энергии в ограниченном методе Хартри-Фока в приближении центрального поля. Случай замкнутых и незамкнутых оболочек.
4. Уравнения Хартри-Фока в приближении центрального поля.
5. Релятивистское многоэлектронное уравнение Дирака.

6. Релятивистские уравнения Хартри-Фока-Дирака в приближении центрального поля.
7. Теорема вириала для нерелятивистских и релятивистских уравнений Хартри-Фока в приближении центрального поля.

Глава IV. Основные положения теории функционала плотности.

1. Однородный электронный газ и метод Хартри-Фока.
2. Усреднение обменного потенциала и метод Хартри-Фока-Слейтера.
3. Теорема Хоэнберга-Кона.
4. Проблема N - представимости и N - представимость электронной плотности.
5. Метод Кона-Шема.
6. Поправка на самодействие.
7. Спин-поляризованный метод функционала плотности. Спиновая поляризация электронного газа.
8. Возбужденные состояния в теории функционала плотности.

Глава V. Квантовый метод Монте-Карло.

1. Функция распределения и плотность функции распределения.
2. Генераторы случайных чисел.
3. Метод интегрирования Монте-Карло.
4. Вариационный принцип и квантовый метод Монте-Карло.
5. Различные пробные функции в квантовом методе Монте-Карло.
6. Использование функций Грина в методе Монте-Карло.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л.Цюликe, *Квантовая химия*, том.1, Москва, Мир, 1976.
2. Г.Бете, *Квантовая механика*, Москва, Мир, 1965.
3. И.В. Абаренков, В.Ф. Братцев, А.В.Тулуб, *Начала квантовой химии*, Москва, Высшая школа, 1989.
4. С.Реймс, *Теория многоэлектронных систем*, Москва, Мир, 1976.
5. Р.Мак-Вини, Б.Сатклиф, *Квантовая механика молекул*, Москва, Мир, 1972.
6. С.Эпштейн, *Вариационный метод в квантовой химии*, Москва, Мир, 1977.
7. М.И. Петрашень. Е.Д. Трифонов, *Применение теории групп в квантовой механике*. Москва, Наука, 1967.
8. Сб. *Теория неоднородного электронного газа*. Под. ред. С. Лундквиста и Н. Марча, Москва, Мир, 1987.