

Программа дисциплины

Квантовое атомистическое моделирование

Программу составил: В.В. Стегайлов, д-р. ф.-м. наук

Аннотация

Дисциплина посвящена изучению уровней приближений описания электронной структуры в рамках теории функционала электронной плотности для проведения квантового атомистического моделирования, в том числе для описания моделей с электронными возбуждениями. Отдельно рассматриваются вопросы описания неадиабатических процессов, сильных электронных корреляций и полуэмпирического описания химически реагирующих систем.

Цель дисциплины

Знакомство студентов с иерархией методов и подходов для квантового атомистического моделирования различных систем.

Задачи дисциплины

Обучению теоретическим основам квантового атомистического моделирования и освоению практических навыков проведения расчетов соответствующих моделей.

Содержание

1. Связь развития суперкомпьютерных технологий и методов квантового атомистического моделирования. Типы математических библиотек, определяющих производительность кодов для квантового атомистического моделирования. Масштабируемость расчетов на параллельных вычислительных системах.
2. Метод теории функционала электронной плотности в формулировке Кона-Шэма. Отличия и сходства с методом Томаса-Ферми и методом Хартри-Фока. Конечно-температурная формулировка теории функционала электронной плотности. Описание возбужденных состояний в рамках метода теории функционала электронной плотности. Теорема Гельмана-Фейнмана.
3. Понятие о двух основных проблемах теории функционала плотности: ошибка делокализации и ошибка описания статической корреляции. Проявление этих проблем в модели молекулы водорода. Учет сильных электронных корреляций в рамках теории функционала электронной плотности.
4. Метод ограниченного метода Кона-Шэма с открытыми оболочками (ROKS). Структура волновых функций возбужденных состояний. Сходства и отличия со спин-поляризованным методом теории функционала плотности (UKS). Способ получения орбиталей синглетного состояния, его особенности. Функции Ванье. Их максимально локализованный вариант. Расчет центров Ванье для орбиталей в случае расчета с одной Γ -точкой.
5. Метод волновых пакетов и его вариант в формулировке electron Force Field. Составляющие Гамильтониана. Особенности его параметризации. Связь ионной и электронной подсистемы. Учет спинов. Уравнения движения.
6. Метод ReaxFF. Понятие порядка связи. Принцип определения зарядов на атомах. Принципы параметризации моделей ReaxFF для конкретных систем.