

Курс лекций «Моделирование квантовых систем»

Теоретическая часть

1. Введение: основы языка программирования Python для численного моделирования.
2. Метод Галёркина-Ритца
3. Метод конечных разностей на примере одномерной задачи Штурма-Лиувилля.
4. Метод функционала плотности (DFT). Модель Томаса-Ферми, теорема Хоэнберга-Кона, уравнения Кона-Шема. Учет обменного взаимодействия и корреляционной части энергии в DFT.
5. Применение метода LDA на примере задачи об атоме диракия.
6. Метод сильной связи: процедура ортогонализации Левдина, орбитали Слэтера. Интегралы перекрытия орбиталей и учет геометрии решетки. Учет спин-орбитального взаимодействия.
7. Модели одномерных магнетиков. Модель Изинга и модель Гейзенберга. Анзац Бете.

Практическая часть

1. Метод Галёркина-Ритца: поиск энергетического спектра в параболической квантовой яме
2. Метод конечных разностей: построение матриц операторов на сетке. Моделирование решений 1D-уравнения Шредингера в ямах с различными профилями квантующего потенциала.
2. Поиск энергетического спектра атома диракия: точное решение, метод Хартри-Фока, метод LDA.
3. Метод сильной связи: моделирование электронных спектров 2D кристаллов. Спектр графена и монослоёв дихалькогенидов переходных металлов.
4. Метод сильной связи: поиск электронных состояний в полоске из графена.
5. Моделирование спектра возбуждений в спиновых цепочках.