

Моделирование квантовых систем

Автор

Ю.И.Ожигов, д.ф.м.н., профессор

Содержание дисциплины

- 1) Функциональные производные. Принцип наименьшего действия в классической механике.
- 2) Интегралы по траекториям Фейнмана. Эквивалентность стандартной формулировке квантовой теории.
- 3) Критерий применимости классической механики через величину действия.
- 4) Ядро свободной частицы. Ядро для квадратичных лагранжианов.
- 5) Квантовый гармонический осциллятор. Система взаимодействующих осцилляторов. Каноническое преобразование.
- 6) Метод малых возмущений.
- 7) Уравнения Маквелла. Скалярный и векторный потенциалы. Калибровка. Релятивистская инвариантность и 4-векторы.
- 8) Приведение поля к системе осцилляторов с внешней силой.
- 9) Квантовая электродинамика в виде интегралов по путям. Аналогия с механикой (без доказательства). Испускание и поглощение фотона атомом.
- 10) Задачи молекулярной динамики.
- 11) Фермионные ансамбли. Электронные состояния молекулы. Метод Хартри-Фока для поиска основного состояния многоэлектронной системы. Уточнение для одного-двух электронов: метод Монте Карло. Спиновые состояния. Антисимметрия. Понятие о методах ЛКАО. Химические реакции.
- 12) Стереотипные задачи физики многих частиц. Задачи квантовой химии и квантовой биохимии.