

УЧЕБНО-ТЕМАТИЧЕСКИЙ ПЛАН
программы повышения квалификации
«Современные методы теоретической химии, вычислительная квантовая химия»

Концепция программы: Курс позволяет изучить передовые методы физики и квантовой химии и узнать методы современных вычислений. При исследовании молекулярной структуры особое внимание будет уделено теории функционала плотности (Density Functional Theory, DFT)

Категория слушателей - научно-педагогические работники

Срок обучения: - 108 часов

Форма обучения: очная

Режим занятий: 4/6 часов в день

Преподаватель: Энрико Бенасси (PhD в области химии (Университет Модены и Реджио-Эмилия, Италия))

Язык: английский (с ассистентом, владеющим русским языком).

Advanced Methods for the Theoretical Chemistry
(36 hours)

Tensor Calculus
Classical Mechanics and Field Theory
Fundamental Non-Relativistic Quantum Mechanics
Second Quantization
Relativistic Quantum Mechanics
Electromagnetic Molecular Properties
Exactly Solvable Models

Computational Laboratory of Quantum Chemistry I
(36 hours)

Overview of Computational Chemistry
Hartree-Fock Theory and *post* Hartree-Fock Methods
Density Functional Theory
Introduction to UNIX/Linux environment
Introduction to the Usage of GaussView
Single Point Energy Calculations and Properties of the Ground State
Geometry Optimisation
Frequency Calculations and Thermochemistry

Computational Laboratory of Quantum Chemistry II
(36 hours)

Benchmarking
Chemical Reactions and Reactivity
Excited states Investigation and Spectroscopies
Solvent Effects
Chirality
Calculation of pK_a
Calculation of IP/EA and Redox Potential
H-Bonding
PBE calculations