



研究生课程教学大纲

课程名称:	固体量子化学		
	Solid State Quantum Chemistry		
课程编号:	ZX14402T		
开课单位:	材料科学与工 程学院	开课学 期:	秋季
课内学时:	48	学分:	3
适用学科专业及层次:	材料、物理或化学类研究生及高年级本科生		
预修课程:	普通物理（或物理化学）、量子力学（或结构化学）		
任课教师:	任浩		

一、课程性质、学习目标及要求

（正文为宋体小四号字。简要介绍课程的性质、学习目标及学习要求。课程性质指校管课必修课、校管选修课，专业核心课、非核心课等。）

1) 课程性质: 专业核心课

理论计算在现代材料学相关领域前沿研究中起到了越来越重要的作用，不仅用以解释实验现象、揭示微观机理，还可以基于第一性原理预测实验结果、进行新型材料理性设计。然而，目前研究生新生的知识储备距实际科研活动中用到的计算方法和技术有较大的缺口。针对这一点，本课程将以材料物理或材料化学低年级研究生的知识储备为基础，着重讲述量子化学基本原理和计算方法及其在材料性质计算和设计方面的应用。本课程面向材料、物理、或化学专业研究生或高年级本科生开设，力图通过较短时间的课程学习，为从事理论计算方向的研究生补足理论基础；同时，本课程也可为从事实验研究的研究者提供一份理论方法的概略材料。

2) 学习目标及要求:

通过本课程的学习，同学们将了解量子化学基本原理和现代电子结构理论框架，掌握常用的计算技术，如自洽循环、频率分析、基组和泛函的选择、以及一些半经验方法等。一方面能够迅速积累知识和技巧，满足日常科研活动对基础理论和计算技术的需求；另一方面，可以搭起一个概略的知识框架，在日后的科研和学习中能够快速定位自身知识结构的问题，高效补全所需的背景知识。

二、课程内容与学时分配

（正文为宋体小四号字。介绍各章节讲授的主要内容及学时分配，各章节需提供二级或三级目录。

第 1 章 绪论（2 学时）

本章重点难点：经典力学理论框架、量子力学基本假设

1. 分析力学回顾：拉格朗日力学、哈密顿力学、泊松括号
2. 算符与 Dirac 括号
3. 量子力学基本假设
4. 一维体系：势箱和简谐振子

第 2 章：多电子问题（4 学时）

本章重点难点：多电子体系哈密顿量

1. 原子单位
2. 多电子体系哈密顿量
3. 计算化学近似

第 3 章 Hartree-Fock 及自洽场方法（12 学时）

本章重点难点：HF 方法、电子相关的来源及处理方法

1. Hartree 乘积、反对称性及 Slater 行列式
2. Hartree-Fock 方程及其解释
3. Roothaan 方程和 SCF 迭代
4. 电子相关：组态相关和 Møller-Plesset 多体微扰理论
5. 扩展：全同粒子和二次量子化

第 4 章 密度泛函理论（6 学时）

本章重点难点：HK 定理、KS 方程

1. Thomas-Fermi 理论
2. Hohenberg-Kohn 定理和现代密度泛函理论
3. Kohn-Sham 方程及解释
4. 交换相关泛函

第 5 章 分子体系（4 学时）

本章重点难点：GTO 基组，分子轨道理论

1. 原子轨道基组：Slater 和 Gaussian 类型轨道
2. 多原子分子：MO-LCAO 和力学量矩阵元

第 6 章 固体材料计算（8 学时）

本章重点难点：周期性体系的描述和处理，PAW 方法及力学量的描述

1. Bloch 定理与周期性边界条件
2. 平面波基组
3. 费米理论与常见费米种类
4. 平面费米波 (PAW) 方法及应用 (VASP 实现)

第 7 章 梯度及性质计算 (6 学时)

本章重点难点：能量梯度、响应

1. 能量梯度和 Hessian 矩阵
2. 过渡态搜索
3. 从头算分子动力学
4. 电子激发与光学性质

第 8 章 半经验方法 (6 学时)

本章重点难点：紧束缚近似

1. Hückel 近似与 Pariser-Parr-Pople 方法
2. 紧束缚近似：石墨烯的能带结构
3. 自洽密度泛函紧束缚方法 (SC-DFTB)

三、教学方式及要求

(正文为宋体小四号字。主要说明教学方式和课堂学习要求，比如讲授、实验、讨论、案例分析等。)

本课程将主要以课堂讲授的方式进行，其中板书内容约占 30%-50%。理论性强的部分，如经典力学回顾、Hartree-Fock 方法、分子轨道理论等部分需要随堂推导。

四、考核及方式

(正文为宋体小四号字。要求说明课程考核和成绩评定办法。考核方式分为考试和考查两种，考试分开卷考试和闭卷考试，考查主要指课程论文、竞赛及各类设计等其他形式的考核。成绩评定应体现平常考核成绩。)

本课程将结合平时成绩和期末考试进行考核。平时成绩由作业和文献阅读部分组成；期末考试为闭卷考试。

五、教材与主要参考书目

(正文为宋体小四号字。正式出版教材要求注明教材名称、作者姓名、出版社、是否自编教材；自编教材要求注明是否成册、编写者姓名、编写者职称、字数等。)

主要参考书目：

1. 徐光宪、黎乐民、王德民，《量子化学：基本原理和从头计算法》(第二版)，科学出版社，2012.

2. 李新征、王恩哥,《分子及凝聚态系统物性的计算模拟》,北京大学出版社, 2014.

学位评定分委员会主席

或教授委员会主任

签字:

日期: