

Universitatea "Babeş-Bolyai" Cluj-Napoca
Facultatea de Fizică
Catedra de Fizică Biomedicală
Anul universitar 2009-2010
Semestrul II

Syllabus

I. Informații generale despre curs, seminar și lucrări de laborator

Titlul disciplinei:	Modele și metode teoretice în fizica stării condensate
Codul	FSD0003
Nr. credite	20
Nr. ore săptămânal	2 curs + 1 seminar
Locul de desfășurare	Amfiteatrul „Augustin Maior”, Rețeaua de calculatoare a Facultății de Fizică, sala 215
Programarea în orar	conform orarului

II. Informații despre titularul de curs

Nume	Vasile CHIȘ, Ioan GROSU
Gradul didactic	profesor
Titlul științific	doctor
E-mail	vchis@phys.ubbcluj.ro; gin@phys.ubbcluj.ro
Telefon	405300 int.5153; int.5168
Ore de audiență	Joi, 9-11; Marți 12-14

III. Descrierea disciplinei

Obiectivele cursului:

În cadrul acestui curs vor fi prezentate teoriile fizice pe care se bazează metodele de calcul analitic și numeric folosite în modelarea sistemelor moleculare. În particular, cursul va fi concentrat pe prezentarea metodei DFT (Density Functional Theory) folosită pentru investigarea structurii electronice a moleculelor sau a sistemelor moleculare complexe cu aplicații în nanoelectronică.

Informațiile teoretice vor fi prezentate împreună cu exemple practice de calcul a diferitelor proprietăți electronice moleculare. Necesitatea cursului este datorată faptului că tot mai mulți cercetători recurg la calculul structurii electronice a moleculelor și la efectuarea modelărilor cu ajutorul computerelor pentru a înțelege și interpreta rezultatele experimentale. De asemenea, studenții vor dobândi cunostințele minimale legate de sistemele de multe particule, funcțiile de raspuns ale sistemelor complexe, precum și proprietățile de baza ale acestora.

Obiectivele urmărite sunt ca studenții să:

- înțeleagă teoriile folosite în calculul structurii electronice a moleculelor și aproximațiile pe care se bazează aceste teorii
- înțeleagă modul de construcție al seturilor de bază folosite în expansiunea orbitalilor moleculari
- înțeleagă și să explice corelarea electronică și să folosească corect metodele computeristice pentru considerarea acestui fenomen în investigarea structurii electronice a sistemelor moleculare.
- formeze corect diferite combinații de funcționale de schimb-corelare pentru calculul diferitelor proprietăți moleculare

- folosească corect metodele teoretice de calcul pentru a obține proprietăți particulare precum: energiile orbitalilor moleculari, spectrele vibraționale, RMN, RES, UV-Vis ale moleculelor
- utilizeze corect modelele de solvatare continue și discrete
- înțeleagă și să folosească metodele folosite pentru calculul proprietăților sistemelor periodice (polimeri, suprafețe, cristale)

Abilități dobândite:

Studentii vor:

- dobândi abilități pentru definirea și formularea unor probleme de cercetare legate de structura electronică a moleculelor sau a sistemelor moleculare complexe cu aplicații în nanotehnologie
- putea modela sisteme moleculare cu ajutorul computerelor și vor putea extrage și prelucra informația relevantă pentru descrierea acestor sisteme
- fi capabili să rezolve diferite probleme fizico-chimice prin folosirea unor competențe obținute în domenii conexe precum: fizică, chimie, matematică, informatică
- fi capabili să analizeze critic și evalueze diferite modele fizice
- putea să propună și să conducă proiecte de cercetare în domeniul nanotehnologiei, legate de structura electronică a sistemelor moleculare complexe
- putea modela sistemele de mai multe particule, vor putea analiza funcțiile de răspuns ale sistemelor complexe, precum și proprietățile de bază ale acestora.
- fi capabili să construiască diferite modele în fizica stării condensate

IV. Bibliografie obligatorie

1. Wolfram Koch, Max C. Holthausen, *A Chemist's Guide to Density Functional Theory*, Wiley, 2001
2. A. Hincliffe, *Modelling Molecular Structures* in Wiley Series in Theoretical Chemistry, (D. Clary et al. Eds.), John Wiley and Sons, Chichester, 2000
3. D. C. Young, *Computational Chemistry*, John Wiley and Sons, 2001
4. J. B. Foresman, A. Frisch, *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods*, Gaussian Inc., 1996
5. W. Kohn, A. D. Becke, and R. G. Parr, Density Functional Theory of Electronic Structure, *J. Phys. Chem.* 100, 12974-12980 (1996)
6. J. N. Israelachvili, *Intermolecular and Surface Forces*, Academic Press, 1998
7. S. Grimme, *Semiempirical GGA-Type Density Functional Constructed with a Long-Range Dispersion Correction*, *J. Comput. Chem.*, 27, 1787 (2006)
8. S. Grimme, *Accurate Description of van der Waals Complexes by Density Functional Theory Including Empirical Corrections*, *J. Comput. Chem.*, 25, 1463 (2004)
9. Iwona Dabkowska, Haydee Valdes Gonzalez, Petr Jurecka, Pavel Hobza, *J. Phys. Chem. A* 2005, 109, 1131-1136
10. Kwang S. Kim, P. Tarakeshwar, and Jin Yong Lee, *Molecular Clusters of π -Systems: Theoretical Studies of Structures, Spectra, and Origin of Interaction Energies*, *Chem. Rev.* 2000, 100, 4145-4185
11. Fabrizio Santoro, Vincenzo Barone, Roberto Improta, *Can TD-DFT Calculations Accurately Describe the Excited States Behavior of Stacked Nucleobases? The Cytosine: Dimer as a Test Case*, *J. Comput. Chem.*, 29, 957 (2007)
12. Changwoong Chu, Jeong-Seok Na, and Gregory N. Parsons, *Conductivity in Alkylamine/Gold and Alkanethiol/Gold Molecular Junctions Measured in Molecule/Nanoparticle/Molecule Bridges and Conducting Probe Structures*, *J. Am. Chem. Soc.*, 2007, 129, 2287-2296

13. Jorge M. Seminario, Luis E. Córdova, Pedro A. Derosa, *An Ab Initio Approach to the Calculation of Current–Voltage Characteristics of Programmable Molecular Devices*, PROCEEDINGS OF THE IEEE, VOL. 91, 1957 (2003)
14. F. Izmaylov, G. E. Scuseria, and M. J. Frisch, *J. Chem. Phys.* 125, 104103 (2006).
15. S. Franzen, *Use of Periodic Boundary Conditions To Calculate Accurate β -Sheet Frequencies Using Density Functional Theory*, *J. Phys. Chem. A*, 2003, 107 (46), pp 9898–9902
16. Metode cuantice pentru studiul sistemelor cu multe particule. Aplicatii la sisteme fermionice si bosonice, I.Tifrea, I.Grosu, M.Crisan, Presa Universitara Clujeana, 2005
17. Teoria materiei condensate: Probleme, I.Grosu, I.Tifrea, Casa cartii de stiinta, 2006

V. Materiale folosite în cadrul procesului educațional specific disciplinei:

- a) la **curs**: calculator și videoproiector, tablă, soft dedicat
- b) la **laborator**: calculatoare, soft dedicat

VI. Planificarea/Calendarul întâlnirilor și a verificărilor/examinărilor intermediare

VI.a CURS

Nr. curs	Curs/conținut	Nr. ore	Bibliografie
1	Teoria funcționalei de densitate (DFT) Teoremele Hohenberg-Kohn; Formalismul Kohn-Sham; Aproximația densității locale; Funcționale de schimb-corelare; Metode post Hartree-Fock: Metoda MP2 și metode CIS	2	[1] 29-88 [2] 218-227 [3] 42-46 [4] 118-124
2	Seturi de bază Orbitali STO și GTO ; Contractii și scheme de contractare ; Seturi de tip EPR și IGLO ; Unde plane ; Scheme pentru analiza de populație	2	[2] 154-171 [3] 78-89; 99-103 [4] 97-103
3	Stări moleculare excitate Teoria TDDFT; Gap-uri HOMO-LUMO; Calculul spectrelor UV-Vis	2	[3] 216-220 [4] 213-218
4	Modelarea interacțiunilor slabe Interacțiuni intra și intermoleculare ; Legături de hidrogen ; Interacțiuni Van der Waals ; π - π stacking	2	[1] 217-236 [6] 83-105; 122-133
5	Calculul spectrelor moleculare Calculul spectrelor IR, Raman, RMN, RES; Calculul densității de stări; Modelarea interacțiunii moleculă-suprafață	2	[2] 265-300
6	Efecte de solvent Metode de solvatare continue și discrete ; Metoda Oniom	2	[3] 206-212 [2] 250-260 [4] 237-242
7	Calculul DFT al sistemelor periodice Modelarea polimerilor și a suprafețelor de siliciu și grafit	2	[14], [15]
8	Cuantificarea a doua. Fermioni si bosoni. Operatori in	2	[16], [17]

	cuantificarea a doua.		
9	Ecuatia de miscare. Reprezentari. Metoda ecuatiei de miscare. Aproximatia Hartree.	2	[16], [17]
10	Aproximatia Hartree-Fock.	2	[16], [17]
11	Miscarea unei excitatii particula-gol. RPA. Plasmoni.	2	[16], [17]
12	Functia Lindhard. Efecte de dimensionalitate. Ecuatia Landau. Sunetul nul.	2	[16], [17]
13	Teoria raspunsului liniar. Susceptibilitatea dinamica. Instabilitatea Stoner.	2	[16], [17]
14	Functia Green fermionica la T=0 K. Interactii. Ecuatia Dyson.	2	[16], [17]

VI.b Seminar

Nr. seminar	Seminar/Conținut	Nr. ore	Bibliografie
1	Funcționale de schimb corelare; DFT cu corecție dispersivă	1	[1] 29-88 [2] 218-227 [3] 42-46 [4] 118-124 [7], [8]
2	Seturi de bază; Calculul energiilor de interacțiune. Eroarea suprapunerii seturilor de bază	1	[2] 154-171 [3] 78-89; 99-103 [4] 97-103
3	Calculul energiei și formei orbitalilor moleculari și a densității stărilor ocupate; Calculul spectrelor electronice de absorbție;	1	[11]
4	Potențiale de interacțiune moleculară pentru sisteme cu legături π	1	[9], [10]
5	Calculul spectrelor RMN și RES.	1	[1] 197-209 [3] 252-254 [2] 304-316 [1] 211-214 [3] 110-111
6	Interacțiuni molecula – electrod metalic; Proprietăților joncțiunilor moleculă – metal. Calculul caracteristicilor I-V	1	[12], [13]
7	Calculul energiei polimerilor și a suprafețelor de Si și carbon; Analiza influenței suprafeței asupra structurii electronice a moleculelor	1	[14], [15]
8	Cuantificarea a doua. Fermioni si bosoni. Operatori in cuantificarea a doua.	1	[16], [17]
9	Ecuatia de miscare. Reprezentari. Metoda ecuatiei de miscare. Aproximatia Hartree.	1	[16], [17]
10	Aproximatia Hartree-Fock.	1	[16], [17]
11	Miscarea unei excitatii particula-gol. RPA. Plasmoni.	1	[16], [17]

12	Functia Lindhard. Efecte de dimensionalitate. Ecuatia Landau. Sunetul nul.	1	[16], [17]
13	Teoria raspunsului liniar. Susceptibilitatea dinamica. Instabilitatea Stoner.	1	[16], [17]
14	Functia Green fermionica la T=0 K. Interactii. Ecuatia Dyson.	1	[16], [17]

VII. Modul de evaluare

Stabilirea calificativului final se va face în urma unui test grila cu zece întrebări (30%), a unui calcul de optimizare de geometrie și calcul de proprietăți pentru un sistem dat (30%) și a unui proiect de cercetare la alegerea studenților (30%). 10% din nota finală se acordă din oficiu.

VIII. Detalii organizatorice, gestionarea situațiilor excepționale

Prezența la cursuri este opțională. Efectuarea lucrărilor de laborator este obligatorie. Recuperarea lucrărilor de laborator se va putea face cu respectarea hotărârilor Consiliului Profesorat al Facultății, în acord cu cadrul didactic responsabil cu activitatea de laborator.

Eventualele situații de fraudă la examen vor fi sancționate conform prevederilor regulamentului de credite transferabile al universității și hotărârilor Consiliului Profesorat al Facultății.

Plagiat se va considera orice lucrare care se constată a fi în proporție de cel puțin 50% copiată dintr-o altă sursă, iar utilizarea plagiatului la lucrările elaborate va determina anularea evaluării.

Orice contestație a notei obținute va trebui însoțită de o cerere din partea studentului pentru reevaluarea lucrării. Rezultatul acestei reevaluări se va face de față cu studenții în decurs de 2 zile de la data contestației.

Bibliografie opțională

18. R.G.Parr, W.Yang, *Density Functional Theory of Atoms and Molecules*, Oxford University Press, New York, 1989
19. J.A.Pople, D.L.Beveridge, *Aproximate Molecular Orbitals Theory*, McGraw-Hill, New York, 1970
20. W.J.Hehre, L.Radom, P.v.R.Schleyer, J.A.Pople, *Ab Initio Molecular Orbital Theory*, John Willey & Sons, New York, 1986
21. F.Jensen, *Introduction to Computational Chemistry*, John Wiley and Sons, New York, 2001
22. Quantum theory of the electron liquid, G.F.Giuliani, G.Vignale, Cambridge University Press, 2005

Semnătura titularului
Prof. dr. Vasile Chiș



Prof.dr. Ioan Grosu