

I. Tematica

1. Fundamentele teoriei funcționalei de densitate (DFT)

- 1.1. Problema cu mai mulți electroni; aproximația Born–Oppenheimer; suprafețe de energie potențială.
- 1.2. Teoremele Hohenberg–Kohn; schema Kohn–Sham; energia de schimb-corelație.
- 1.3. Ierarhia funcționalelor: LDA, GGA, meta-GGA, hibride, hibride cu separarea domeniului, dubluhibride.
- 1.4. Corecții empirice de dispersie (D3, D3(BJ), D4) și situațiile în care sunt necesare.
- 1.5. Seturi de bază gaussiene: funcții de polarizare și difuze, familia def2, potențiale efective de miez; aproximații de rezoluție a identității (RI-J, RIJCOSX).

2. Procedee de calcul și mărimi derivate

- 2.1. Optimizarea geometriei; localizarea stărilor de tranziție; coordonata intrinsecă de reacție.
- 2.2. Analiza frecvențelor armonice; verificarea naturii punctului staționar; corecții de energie de punct zero, entalpie și energie liberă Gibbs.
- 2.3. Energii de disociere de legătură, energii de reacție, bariere de activare; surse uzuale de eroare.
- 2.4. Analiza populațiilor și a densității de spin (Mulliken, Löwdin, Hirshfeld, NBO, CHELPG); ordine de legătură și stări formale de oxidare.

3. Structura electronică a complexelor metalelor tranziționale

- 3.1. Configurații d, câmp de liganzi, stări de spin; energii relative de spin și dependența lor de funcțională.
- 3.2. Stările de oxidare ale metalelor tranziționale; centri super-reduși.
- 3.3. Corelație statică și corelație dinamică; soluții broken-symmetry; limitele metodelor monoreferențiale.
- 3.4. Elemente de metode multireferențiale (CASSCF, NEVPT2, CASPT2) și de cuplaj de clusteri (CCSD(T)) folosite ca referință de etalonare.

II. Bibliografia

- 1. F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry, ed. a 3-a, Wiley, Chichester, 2017.
- 2. C. J. Cramer, Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, ed. a 2-a, Wiley, Chichester, 2004.