小论文主题

## 编程实践类

1. 编写一个基于Gaussian基组、能处理双原子分子的Hartree-Fock程序（可以调用libint计算双电子积分）。

参考文献：【Szabo & Ostlund】，Chapter 3.

1. 编写一个针对满壳层或半满壳层原子（轨道可以表达成径向函数和球谐函数的乘积）的LDA-DFT程序。

【参考文献】J. M. Thijssen, Computational Physics, Chapter 5.

1. 编写一个二维解析外势场下的LDA计算程序

【参考文献】Hong Jiang, Harold U. Baranger and Weitao Yang, *Density-functional theory simulation of large quantum dots*, [Phys. Rev. B 68, 165337 (2003)](http://link.aps.org/abstract/PRB/v68/e165337)。

## 文献综述类

1. SCF迭代收敛加速方法综述，并结合几个典型的实例，比如H2O，CH2（双自由基卡宾），[Fe(H2O)6]2+等测试比较不同方法（计算程序：Gaussian09）。
2. 量子化学计算中的过渡态（反应路径）优化方法
3. 范德华修正的DFT方法综述
4. 针对强关联体系的DFT方法
5. 线性标度量子化学方法
6. 针对固体体系的post-HF量子化学方法
7. 含时密度泛函理论在染料敏化太阳能电池研究中的应用
8. 电子结构理论在多相催化研究中的应用
9. 电子结构理论在锂离子电池研究中的应用
10. 电子结构理论在有机光电材料研究中的应用
11. 电子结构理论在无机光伏材料研究中的应用
12. 电子结构理论在光催化材料研究中的应用
13. 机器学习方法在电子结构理论中的应用