

Pozvánka na přednášku

Elementy teorie funkcionálu hustoty

Prof. Bedřich Velický, CSc.

Téměř padesát let od svého zavedení zůstává teorie funkcionálu hustoty (density functional theory – DFT) základem výpočetních postupů, které převládají v oblasti elektronové struktury kondensovaných systémů. Tyto dvě přednášky jsou určeny pro doktorandy a jiné nespecialisty. Budou věnovány fyzikálním a pojmovým základům DFT, otázky implementace DFT pro skutečné výpočty zůstanou stranou.

Přednáška I. – pátek 1. 11. 2013, 9:00 – 10:30

Obecné vlastnosti mnohaelektronových systémů

Jellium

Hohenberg-Kohnova teorie

Kohn-Shamova teorie

Spinově polarizované DFT

Přiblížení lokální hustoty (Local Density Approximation – LDA)

Vykročení za LDA

Přednáška II. – pátek 1. 11. 2013, 10:45 – 12:30

Kohn-Shamovy orbitály a energie

“Gap problem” v polovodičích

Self-interakce

Případová studie: Polonekonečné jellium

Přednášky se uskuteční v rámci série KFPP 514 Fyzika povrchů

MFF UK, V Holešovičkách 2

posluchárna 042 v přízemí