

Seminář odd. 26

Tenkých vrstev a nanostruktur

Fyzikální ústav AVČR, Cukrovarnická 10, Praha 6

datum: 4. 2. 2014 úterý

čas: 10:00

mítnost: knihovna, budova A, 1.p.

TÉMA

Kvantové Monte Carlo simulace elektronové struktury pevných látek

Jindřich Kolorenč

Oddělení teorie kondenzovaných látek, Fyzikální ústav AV ČR, v.v.i.

Na semináři budou popsány základní principy takzvané difuzní Monte Carlo metody, která umožňuje určovat vlastnosti základního stavu kvantových mnohočásticových systémů s velmi vysokou přesností. Jak název metody napovídá, transformace kvantové úlohy do podoby klasického stochastického procesu simulovatelného počítačem je postavena na podobnosti Schrödingerovy a difuzní rovnice. Difuzní Monte Carlo metoda nachází uplatnění při studiu elektronové struktury široké škály systémů, od konečných (atomů a molekul) až po rozlehlé (pevné látky). Na semináři budou možnosti a schopnosti metody ilustrovány aplikacemi ve fyzice pevných látek.

odborný garant: *Ing. Pavel Jelínek, Ph.D.*