

Sűrűségfunkcionál elmélet (KDIT33)

tematika

Oktató: Dr. Paragi Gábor (paragi@sol.cc.u-szeged.hu)

1. Rövid bevezetés a funkcionálokról: Matematikai háttér; funkcionál derivált; funkcionálok szerepe a fizikában.
2. Atomok és molekulák Schrodinger-egyenlete: A változók számának csökkentése. Stacionárius eset, Adiabtikus és Born-Oppenheimer közelítés, függetlenrészcseke modell.
3. A Hartree-Fock módszer elméleti háttere, a Fock operátor tagjai.
4. A Hohenberg-Kohn tételek levezetése nem-degenerált, alapállapotú N-elektron rendszerek esetében.
5. A sűrűségfunkcionál elmélet korai szakasza: A Thomas-Fermi-féle kinetikus funkcionál levezetése.
6. A Kohn-Sham kép. A Kohn-Sham egyenletek levezetése.
7. Kicserélődési Funkcionálok a DFT-ben: A lokális-sűrűség közelítés. Az $X\alpha$ energiafunkcionál levezetése.
8. Túl a lokális-sűrűség közelítésen: Gradiens korrekciót tartalmazó funkcionálok. Hibrid funkcionálok.
9. Korreláció a DFT-ben. Lokális-sűrűség közelítés és gradiens korrekciót tartalmazó funkcionálok.
10. Gerjesztett állapotú rendszerek vizsgálata: A sokasági DFT; a lineáris válasz elmélet alapjai.
11. Kitekintés néhány aktuális kutatási irányra: Sűrűségmátrix-funkcionál elmélet. Erősen kölcsönható elektronrendszerek és a Kohn-Sham kép.