

# **SEMINARIUM Z MAGNETYZMU I NADPRZEWODNICTWA**

Uprzejmie zawiadamiamy, że w **środę**

**16 stycznia 2019 r., o godz.10:00**

w sali 203 (bud. 1) odbędzie się seminarium, na którym

**prof. dr hab. Piotr Bogusławski**

*Institut Fizyki PAN, Warszawa*

wyłosi referat na temat:

## **„Wstęp do wstępu do teorii funkcjonału gęstości” część 1**

W latach 80. ubiegłego stulecia nastąpił gwałtowny rozwój obliczeń struktury elektronowej ciał stałych i molekuł przewodzących w ramach teorii funkcjonału gęstości (DFT). Obecnie jest to bodaj najbardziej popularna metoda obliczeniowa. DFT daje doskonałe wyniki dla wielu własności stanu podstawowego układu. Użycie przybliżonych wersji funkcjonałów wymiany i korelacji do obliczeń własności stanów wzbudzonych (np. przerwy wzbronionej izolatorów) prowadzi do poważnych niezgodności z doświadczeniem.

W trakcie wykładu omówię efekty wymiany i korelacji dla prostych układów wieloelektronowych, czyli dla atomu He i dla jednorodnego gazu elektronowego. Następnie przedstawię przybliżenie lokalnej gęstości (LDA), problemy z nim związane, oraz najprostsze sposoby rozwiązania owych problemów.

Serdecznie zapraszamy

Roman Puźniak  
Henryk Szymczak  
Andrzej Szewczyk