

SEMINARIUM Z MAGNETYZMU I NADPRZEWODNICTWA

Uprzejmie zawiadamiamy, że w **środę**

30 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 3

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