

FDIT180uj Sűrűségfunkcionál elmélet

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

Tárgyleírás: A kurzus elsődleges célja, hogy áttekintést adjon a doktori képzésben résztvevő hallgatónak *i)* a Sűrűségfunkcionál elmélet precíz elméleti háttéréről; *ii)* Az alkalmazási lehetőségek korlátairól; *iii)* Néhány aktuális elméleti kutatási irányról. Ennek eredményeként a hallgató képessé válik a sűrűségfunkcionál elmélet kritikus alkalmazására az elektronszerkezeti problémák vizsgálata során.

Tematika:

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. Kicszerélődési funkcionálok a sűrűségfunkcionál elméletben: A lokális-sűrűség közelítés. Az $X\alpha$ energiafunkcionál levezetése.
8. Túl a lokális-sűrűség közelítésen: Gradienses korrekciót tartalmazó funkcionálok. Hibrid funkcionálok.
9. Korreláció a sűrűségfunkcionál elméletben. Lokális-sűrűség közelítés és gradienses korrekciót tartalmazó funkcionálok.
10. Gerjesztett állapotú rendszerek vizsgálata: A sokasági sűrűségfunkcionál elmélet; a lineáris válasz elmélet alapjai.
11. Kitekintés néhány aktuális kutatási irányra: Sűrűségmátrix-funkcionál elmélet. Erősen kölcsönható elektronrendszerek és a Kohn–Sham kép.

Irodalom:

- Nagy Ágnes: Molekulák sűrűségfunkcionál elmélete (egyetemi jegyzet, Debreceni Egyetem)
- Robert G. Parr, Weitao Yang: Density-Functional Theory of Atoms and Molecules (Oxford University Press, 1989)
- Reinier M. Dreizler, Eberhard K. U. Gross: Density Functional Theory: An Approach to the Quantum Many-body Problem (Springer Berlin, Heidelberg, 1990)

- Carsten Ullrich: Time-dependent density-functional theory: Concepts and Applications
(Oxford University Press, 2012)