

Wykład ab-initio – zagadnienia

1. kwantowe układy wielu cząstek – funkcja falowa
2. hamiltonian układu wielu elektronów w ciele stałym – podst. przybliżenia
3. przybliżenie średniego pola (ogólnie)
4. tw. H-K – treść, konsekwencje
5. metoda K-S – algorytm, stosowalność
6. funkcjonal gęstości – składowe, człon x_c
7. pseudopotencjały
8. metody obliczania struktury pasmowej (PW,OPW,APW)
9. metoda LCAO
10. poprawianie wyników DFT – GW i LDA+U
11. dynamika molekularna – ab-initio vs klasyczna
12. informacje praktyczne