

A sűrűség funkcionál elmélet alapjai / Foundations of density functional theory (2/0/0/v/3)

Tárgyfelelős / Responsible lecturer: Pipek János

Sok-részecskés Fock-tér és sűrűségoperátor. Redukált sűrűségoperátorok. A kölcsönható elektron rendszerek egzakt egyenletei és a független részecske közelítés sűrűségoperátor képben. N -előállíthatóság. A Fermi-lyuk és a lokalizált pályák. Az elektron sűrűség. Kato tétele és a cusp (csúcs) feltételek. Az elektron sűrűség ν és N előállíthatósága. Hohenberg és Kohn tételei. Az univerzális sűrűség funkcionál létezése. A Levy-féle korlátozott keresés módszere. Skálatulajdonságok. Kohn és Sham egyenletei. Tört betöltési számok. A kémiai potenciál és az elektronnegativitás. Közelítő módszerek. Gradiens sorfejtés. Modern funkcionálok.

Many-body Fock space and density operator. Reduced density operators. Exact equations and the independent particle approximation for the interacting electron gas in the density operator picture. N -representability. The Fermi hole and localized orbitals. The electron density. Kato's theorem and cusp conditions. The ν - and N -representability of the electron density. The Hohenberg-Kohn theorems. Existence of the universal density functional. Levy's constrained search. Scaling properties. The Kohn-Sham equations. Fractional occupation numbers. The chemical potential and electronegativity. Approximate methods. The gradient expansion. Recent functionals.

Irodalom / Literature: Nagy Ágnes: Molekulák elektronsűrűség elmélete (KLTE Elméleti Fizika Tsz., Debrecen, 1994); R.M. Dreizler, E.K.U. Gross: Density Functional Theory (Springer, Berlin, 1990); R.G. Parr, W. Yang: Density-functional Theory of Atoms and Molecules (Oxford, New York, 1989); Kapuy Ede: Sűrűségfunkcionálok és alkalmazásuk a kvantummechanikai többtestproblémában (JATE, Szeged).