

## **Szilárdtestek elektronszerkezete I. / Electronic structure of solid matter I. (2/0/0/v/3)**

Tárgyfelelős / Responsible lecturer: Szunyogh László

A tantárgy a Fizika alapképzési (BSC) szakon oktatótt kvantummechanika és szilárdtestfizika ismeretekre építkezve a modern szilárdtestfizikai elektronszerkezeti eljárások elméletei alapjainak és módszertanának megismertetését tűzi ki célul. Kiemelt témakörök: A statikus sűrűségfüggvény elmélet alapjai. Variációs és pszeudopotenciál módszerek. A többszörös szórás elmélete (Green függvényes technika). Korrelált elektronrendszerek ab initio leírására alkalmas módszerek (LDA+U, önkölcsönhatás korrekció, dinamikus átlagtér elmélet). Ötvözetek leírása, a koherens potenciál közelítés. Fémek (itineráns) mágnesség ab initio elmélete, rendezetlen lokális momentumok módszere. Időfüggő sűrűségfüggvény számítások.

Building on the quantum mechanics and solid state physics studies of the Physics BSC education, this course aims to discuss modern theories and methods for the electronic structure of solid matter. The following topics will be outlined: Foundations of the static density functional theory. Variational and pseudopotential methods. The multiple scattering theory (Green function method). Ab initio methods for correlated systems (LDA+U, self-interaction correction, DMFT). Alloy theory, the coherent potential approximation. Metallic (itinerant) magnetism, method of the disordered local moments. Time-dependent density functional calculations.

*Irodalom / Literature:* Sólyom Jenő: A Modern Szilárdtestfizika alapjai II., Elektronok a szilárd testekben (ELTE Eötvös Kiadó, 2003); J. Zabloudil, R. Hammerling, L. Szunyogh, P. Weinberger: Electron Scattering in Solid Matter, Solid-State Sciences Vol. 147, Springer, 2005); válogatott review cikkek