Täthetsfunktionalteori, 6.0 hp

Density Functional Theory, 6.0 credits

Forskarutbildningskurs

6FIFMA8

Institutionen för fysik, kemi och biologi

Gäller från: Första halvår 2025

Fastställd av **Fastställandedatum**

Diarienummer

Behörighetskrav

Grundläggande behörighet till kurser på forskarutbildningsnivå har den som har

- avlagt en examen på avancerad nivå,
- fullgjort kursfordringar om minst 240 högskolepoäng (hp), varav minst 60 hp på avancerad nivå, eller
- på något annat sätt förvärvat motsvarande kunskaper.
- Grundläggande kunskaper i kvantmekanik. Förvärvade antingen genom en grundkurs i kvantmekanik eller en kemiföreläsning med tillräcklig kvantmekanisk komponent.

Lärandemål

Efter avslutad kurs förväntas studenten kunna:
Kunskap och förståelse
• få kunskap om huvudkonceptet och den historiska utvecklingen av täthetsfunktionalteori (DFT)
• tillämpa koncepten på periodiska kristallina system
• tillämpa koncepten på molekylära system
Värderingsförmåga och förhållningssätt
• sammanfatta, representera och diskutera specialämnen relaterade till täthetsfunktionalteori
• Kunna diskutera aktuell forskning och publikationer relaterade till eller som använder täthetsffunktionalteori på en grundläggande nivå

Kursinnehåll

Kursen kommer att ge en introduktion till täthetsfunktionalteori (DFT) och visa grunderna för tillämpningar inom fast tillståndsfysik, kemi och biologi. Den kommer att bestå av tre delar: Introduktion till DFT (Florian Trybel), DFT för periodiska kristallina system (Ferenc Tasnádi) och DFT för molekylära system (Bo Durbeej).

Introduktion till DFT

Denna del av kursen kommer att förklara de teoretiska grunderna för täthetsfunktionalteori och presentera en genomgång av den historiska utvecklingen inom kvantmekanik som ledde till utvecklingen av DFT och dess tillämpningar. Kursen ger en introduktion till Hartree-Fock och Thomas-Fermi-teorin, Hohenberg-Kohm-satserna och Kohn-Sham-ekvationerna. Grundläggande approximationer för utbytes-korrelationsfunktionen kommer att introduceras.

DFT för periodiska kristallina system

Denna del av kursen kommer att diskutera:
(1) tillämpningen av DFT för periodiska, kristallina system.
(2) Begreppet periodiska randvillkor, gitter- och Blochfunktioner samt Wannierfunktioner på en introduktionsnivå.
(3) grunderna i elektronstrukturteori, beräkning av krafter och elektronisk topologi.
(4) beräkning av fononer, grunderna i molekyldynamiksimuleringar och en kort introduktion till maskininlärning av interatomära potentialer baserade på DFT-beräkningar.
(5) bortom standardmetoder: DFT+U, kort introduktion till dynamisk medelfältsteori (DMFT) för korrelerade system.
Denna del av kursen utgör också en bakgrund för kursen Electronic Structure Theory (6FIFM33, 7,5 hp), som ger mer detaljer om tillämpningarna av täthetsfunktionalteori för periodiska kristallina system.

DFT för molekylära system

Denna del av kursen kommer att diskutera:
(1) grunderna för att tillämpa DFT på ändliga molekylära system.
(2) vågfunktionsbaserade metoder utöver Hartree-Fock-teorin.
(3) hybridfunktionaler och meta-GGA.
(4) tidsberoende täthetsfunktionsteori (TDDFT) på en introduktionsnivå.

Undervisnings- och arbetsformer

Föreläsningar med både whiteboard och presentationsteknik

Examination

Muntlig examination

Betygsskala

Tvågradig skala

Kurslitteratur

Litteraturen kommer att diskuteras under kursen.

Övrig information

Planering och genomförande av kursen skall utgå från kursplanens formuleringar. Kursvärdering samt analys och förslag som rör generell utveckling och förbättring av kursen återkopplas till Forsknings- och forskarutbildningsnämnden av kursansvarig lärare.