



## Kursplan

Fakulteten för teknik

Institutionen för fysik och elektroteknik

4FY530 Täthetsfunktionalteori med tillämpningar inom atom- och kondenserade materiens fysik, 7,5 högskolepoäng

Density Functional Theory with applications in atomic and condensed matter physics, 7.5 credits

### Huvudområde

Fysik

### Ämnesgrupp

Fysik

### Nivå

Avancerad nivå

### Fördjupning

A1F

### Fastställande

Fastställd 2016-09-26

Senast reviderad 2021-11-17 av Fakulteten för teknik. Revidering av gamla koder i förkunskaperna.

Kursplanen gäller från och med höstterminen 2022

### Förkunskaper

Fysik 90 hp inklusive en 7,5 hp kurs i kvantmekanik (tex 4FY519) och en 7,5 hp introduktions kurs i fasta tillståndets fysik (tex. 2FY513), matematik 45 hp eller motsvarande.

### Mål

Efter avslutad kurs ska studenten kunna:

- redogöra för den grundläggande bakgrunden för täthetsfunktionalteori (DFT).
- redogöra för skillnaden mellan DFT och andra flerkroppsmetoder.
- redogöra för vilka fysiska egenskaper som kan beräknas med DFT.
- förklara hur elektroner approximeras inom DFT.
- förklara skillnaden mellan olika funktionaler såsom LDA, GGA-PBE, B3LYP.
- beskriva begränsningarna i DFT.
- arbeta med DFT koder som Wien2k, SIESTA, VASP, NRLMOL för att beräkna elektronstrukturen av enkla fasta ämnen.

## Innehåll

### Introduktion till flerelektron problem

- Hartree-Fock (HF) teori.
- Configuration Interaction (CI).
- Praktiska svårigheter i att lösa flerelektron problem.

### Grunderna för DFT

- Thomas-Fermi modellen: föregångare till täthetsfunktionalteori.
- Funktionaler och funktionalers derivat, Euler-Lagrange ekvationen.
- Hohenberg-Kohn sats.
- $N$  och  $v$ -representation av densiteter och att potentialer inte är unika.

### Kohn-Sham (KS) Ekvation

- Effektiv exakt enpartikelmetod för flerkroppssystem.
- Exchange och korrelationsenergi.
- Tolkning av KS egenvärden: Koopmans sats, joniseringsenergi, Fermi yta, bandgap.
- KS ekvation för spinpolariserade system.

### Approximativa funktionaler

- Lokal approximation: local density approximation (LDA).
- Semilokal approximation: generalized gradient approximation (GGA).
- Icke-lokala approximation: hybrid funktional.
- Självinteraktions korrigering.

### Introduktion till tidsberoende DFT

- Runge-Gross sats.
- Tidsberoende Kohn-Sham ekvationen.

### Praktiska genomförandet av DFT metoder

- Allmän metod för att lösa Kohn-Sham ekvationen.
- Fulla potential och pseudo potentiella metoder.
- Basfunktioner: Gaussiska, LAPW, numeriska.
- Tillämpning av DFT metoder för molekyler och fasta ämnen.

## Undervisningsformer

Undervisningen består av föreläsningar och handledning.

Studenterna kan välja att följa kursen på "distans" och följa kursen live via Internet. De inspelade föreläsningar kommer också att publiceras på kursens hemsida.

## Examination

Kursen bedöms med betygen A, B, C, D, E, Fx eller F.

Betyget A utgör det högsta betygssteget, resterande betyg följer i fallande ordning där betyget E utgör det lägsta betygssteget för att vara godkänd. Betyget F innebär att studentens prestationer bedömts som underkända.

Bedömning av de studerandes prestationer sker genom redovisning av obligatoriska uppgifter och en skriftlig tentamen.

Omexamination erbjuds inom sex veckor inom ramen för ordinarie terminstider.

## Kursvärdering

Under kursens genomförande eller i nära anslutning till kursen genomförs en kursvärdering. Resultat och analys av kursvärderingen ska återkopplas till de studenter som genomfört kursen och de studenter som deltar vid nästa kurstillfälle.

Kursvärderingen genomförs anonymt. Den sammanställda rapporten arkiveras vid fakulteten.

## Övrigt

Betygskriterier för A-F-skalan kommuniceras till studenten via särskilt dokument.

Studenten informeras om kursens betygskriterier senast i samband med kursstart.

## Kurslitteratur och övriga läromedel

### Referenslitteratur

1. Density-Functional Theory of Atoms and Molecules by Robert G. Parr and Yang Weitao, Publisher: Oxford University Press (1994), ISBN-13: 978-0195092769.
2. Density Functional Theory: An Advanced Course by Eberhard Engel and Reiner M. Dreizle, Publisher: Springer, 2011 edition, ISBN-13: 978-3642140891.
3. Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods by Richard M. Martin, Publisher: Cambridge University Press; 1 edition (2008), ISBN-13: 978-0521534406.
4. Density Functional Theory: A Practical Introduction by David Sholl and Janice A. Steckel, Publisher: Wiley-Interscience; 1 edition (2009), ISBN-13: 978-0470373170.
5. Selected notes/papers.