

A Sűrűségfunkcionál Elmélet legújabb eredményei és alkalmazásai - Melléktárgy

1. Az időfüggetlen alapállapotú DFT összefoglaló áttekintése
(Hohenberg Kohn tételek, Kohn-Sham kép, alap kicserélődési és korrelációs funkcionálok)
2. Új kicserélődési és korrelációs funkcionálok a DFT-ben.
(Range-separated funkcionálok, meta-GGA funkcionálok, hybrid- és double hybrid funkcionálok)
3. Az alap DFT elmélet kiterjesztése időfüggő esetre
(A Runge-Gross és a van Leeuwen elmélet. Az időfüggő Kohn-Sham kép. Az ALDA módszer és további kicserélődési és korrelációs funkcionálok a TD-DFT-ben.)
4. DFT alkalmazása gerjesztett állapotok számolására
(Lineáris válasz elmélet a TD-DFT-ben, Gerjesztett állapotok számítása az időfüggő DFT segítségével, Ensemble DFT)
5. Sűrűségmátrix funkcionál elmélet.
(DFT kiterjesztése nem tiszta állapotú esetekre)
6. Közelítő módszerek nagy méretű molekuláris rendszerekre
(Density Functional Based Tight Binding (DFTB), „Klasszikus” szemiempirikus módszerek: MNDO, CNDO, ZDO, INDO; modern megközelítések (xTB))
7. Erősen kölcsönható elektronok és DFT
(A Kohn-Sham kép alternatívája: erősen kölcsönható (strongly-correlated) elektron elmélet)