

A
FIZIKAI INTÉZET
és az
ATOMKI
közös
SZEMINÁRIUMA

BENDE ATTILA
(INCDTIM, KOLOZSVÁR)

**Elektron gerjesztések az időfüggő sűrűségfunkcionál
elméletben**

címmel előadást tart

2020. február 21-én, pénteken
14:00 órakor

a

Debreceni Egyetem TTK Fizikai Intézet
E7-es szemináriumi termében
(4026 Debrecen, Bem tér 18/B., I.em E7)

Short abstract: Gerjesztett elektronállapotok tanulmányozása sok atomos molekulák esetén olyan nehézségekbe ütközik, amelyekre a hagyományos, hullámfüggvény alapú elméleti módszerek nehezen tudnak megoldással szolgálni. Elsősorban azért, mert a multi-referenciás Hartree-Fock módszeren alapuló elméletek (pl. CASSCF vagy MRPT2) a nagyszámú aktív elektron, illetve elektron pályák jelenléte miatt óriási számítógépkapacitást igényelnek. Ennek a problémának a feloldására az időfüggő sűrűségfunkcionál elmélet (time-dependent density functional theory, TDDFT) adhat megoldást, melynek segítségével könnyebben és egyszerűbben határozhatók meg az elektronok gerjesztési energiái. Előadásomban röviden összefoglalom a TDDFT módszer elméleti alapjait, beszámolok a módszer alkalmazhatósági korlátairól, továbbá említést teszek más közelítő módszerekről is.