

A
FIZIKAI INTÉZET
és az
ATOMKI
közös
SZEMINÁRIUMA

NAGY ÁGNES
(DE ELMÉLETI FIZIKAI TANSZÉK)

Mi mindent számíthatunk ki az elektronsűrűségből?

címmel előadást tart

2009. június 12-én,
pénteken
11:00 órakor

az

MTA Atommagkutató Intézet
I. épület, alagsori tanácsteremben.

Az előadás kivonata:

Az alapállapotú elektronsűrűség minden információt tartalmaz az elektronrendszerrel, így elvben bármilyen mennyiséget ki tudunk számítani belőle. Mivel azonban, az energia mint az elektronsűrűség funkcionálja egzaktul nem ismert, ezért ez többnyire csak közelítőleg lehetséges. Pl. az elektronsűrűségből ki tudjuk számítani a Kohn-Sham potenciált, de a teljes energiát már nem, ill. csak közelítőleg. Az előadásban szó lesz a kinetikus energia funkcionálderiváltjára vonatkozó differencialegyenletről. Az információelméleti tárgyalás lehetővé teszi, hogy az elektronsűrűségből a kémiai kötésre vonatkozó következtetéseket vonjunk le.