

طرح درس "نظریه تابعی چگالی و کاربردهای آن" (Density Functional Theory: method and applications)

تعداد ۳ واحد، ۴۸ ساعت، نیمسال دوم ۹۹-۹۸

هدف درس: آشنایی با نظریه تابعی چگالی

ردیف	هفته	عنوان مطلب	ملاحظات
۱	هفته اول-جلسه ۱	معرفی درس، منابع و مروری بر مباحث اصلی	
۲	هفته اول-جلسه ۲	مسئله بس ذره ای Many-body	
۳	هفته دوم-جلسه ۱	مروری بر انواع روش‌های محاسبه ساختار نواری	
۴	هفته دوم-جلسه ۲	مروری بر اصل وردش و نظریه اختلال مستقل از زمان	
۵	هفته سوم-جلسه ۱	فراتر از تقریب الکترون مستقل، تقریب هارتری	
۶	هفته سوم-جلسه ۲	آموزش و بکارگیری نرم افزارهای DFT	پرسش و پاسخ
۷	هفته چهارم-جلسه ۱	ادامه روش هارتری	
۸	هفته چهارم-جلسه ۲	آموزش و بکارگیری نرم افزارهای DFT	
۹	هفته پنجم-جلسه ۱	معادله هارتری فوک	
۱۰	هفته پنجم-جلسه ۲	کاربرد نظریه هارتری فوک در گاز الکترون همگن	
۱۱	هفته ششم-جلسه ۱	آموزش و بکارگیری نرم افزارهای DFT	پرسش و پاسخ
۱۲	هفته ششم-جلسه ۲	شکست نظریه هارتری فوک، اثر استتار	
۱۳	هفته هفتم-جلسه ۱	Screening و روش توماس فرمی	
۱۴	هفته هفتم-جلسه ۲	آموزش و بکارگیری نرم افزارهای DFT	
۱۵	هفته هشتم-جلسه ۱	Screening و روش لینهارد	
۱۶	هفته هشتم-جلسه ۲	آموزش و بکارگیری نرم افزارهای DFT	پرسش و پاسخ
۱۷	هفته نهم-جلسه ۱	انرژی Correlation (انرژی در ورای هارتری فوک)	
۱۸	هفته نهم-جلسه ۲	قضیه سایتز و شبکه ویگنر	
۱۹	هفته دهم-جلسه ۱	برگزاری امتحان میان ترم	میان ترم
۲۰	هفته دهم-جلسه ۲	سمینار کلاسی	پرسش و پاسخ
۲۱	هفته یازدهم-جلسه ۱	آموزش و بکارگیری نرم افزارهای DFT	پرسش و پاسخ

	نظریه تابعی چگالی Density Functional Theory، تقریب بورن-اپنهایمر	هفته یازدهم-جلسه ۲	۲۲
	تقریب توماس فرمی و اشکالات آن	هفته دوازدهم-جلسه ۱	۲۳
	قضایای هوهنبرگ - کوهن	هفته دوازدهم-جلسه ۲	۲۴
	معادلات کوهن- شم	هفته سیزدهم-جلسه ۱	۲۵
	تقریب LDA سهم های تبدلی و همبستگی	هفته سیزدهم-جلسه ۲	۲۶
	تقریب GGA سهم های تبدلی و همبستگی	هفته چهاردهم-جلسه ۱	۲۷
پرسش و پاسخ	آموزش و بکارگیری نرم افزارهای DFT	هفته چهاردهم-جلسه ۲	۲۸
	کاربردهای نظریه تابعی چگالی	هفته پانزدهم-جلسه ۱	۲۹
	نقاط ضعف و قوت DFT	هفته پانزدهم-جلسه ۲	۳۰
	ورای DFT، تقریب GW، تقریب بته سالپیتر، تقریب TDDFT	هفته شانزدهم-جلسه ۱	۳۱
	جمع بندی، پرسش و پاسخ و ..	هفته شانزدهم-جلسه ۲	۳۲