

ΕΘΝΙΚΟ ΙΔΡΥΜΑ ΕΡΕΥΝΩΝ
ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΘΕΩΡΗΤΙΚΗΣ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΗΣ ΧΗΜΕΙΑΣ



Δρ. Ν. Γιδόπουλος
Ινστιτούτο Θεωρητικής και Φυσικής Χημείας
Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών
Βασ. Κωνσταντίνου 48, Αθήνα

Permanent Address:
ISIS Facility, STFC
Rutherford Appleton Laboratory
OXFORDSHIRE, UK

Ο Δρ. Ν. Γιδόπουλος, επισκέπτης Ερευνητής του ΙΘΦΧ, θα δώσει σειρά διαλέξεων με θέμα:

*Εισαγωγή και κριτική επισκόπηση της θεωρίας των συναρτησιακών της πυκνότητας
(Density Functional Theory)*

Τρίτη 14/10/08, ώρα 16:00
Τετάρτη 15/10/08, ώρα 16:00
Πέμπτη 16/10/08, ώρα 16:00
(Αίθουσα σεμιναρίων στο ισόγειο του ΕΙΕ)

Κάθε διάλεξη θα διαρκεί περίπου μία ώρα, με δυνατότητα διακοπών για ερωτήσεις / συζήτηση.
Θα καλυφθούν:

- Εισαγωγή
- Θεώρημα Hohenberg-Kohn
- Θεωρία Kohn-Sham
- Local-density approximation
- Υβριδικά συναρτησιακά
- Ακριβής έκφραση για ενέργεια και δυναμικό ανταλλαγής (exact-exchange)
- Άμεσα και έμμεσα συναρτησιακά της πυκνότητας
- Θεωρία βέλτιστου δυναμικού (Optimized Effective Potential)
- Αρχή ελαχίστου που συνδέει DFT με παραδοσιακές μεθόδους κβαντικής χημείας
- Ορισμένα ανοιχτά προβλήματα και σχετική πρόοδος.

Οι δύο πρώτες διαλέξεις θα έχουν χαρακτήρα διδασκαλίας και επισκόπησης, ενώ η τελευταία θα έχει περισσότερο ερευνητικό χαρακτήρα.