

Přehled látky probírané v předmětu Density functional theory KFY/7DFT letní semestr 2025/2026

1 Schrödingerova rovnice souboru stejných částic

1.1 Postuláty kvantové mechaniky

Postulát o vlnové funkci, postulát o operátorech, postulát o kvantování, postulát o redukci vlnové funkce, postulát o nestacionární Schrödingerově rovnici. Matematický aparát kvantové mechaniky.

1.2 Soustavy stejných částic

Nerozlišitelnost částic, operátor záměny částic, symetrické a antisymetrické vlnové funkce. Antisymetrický postulát. Pauliho vylučovací princip.

2 Shrnutí přibližných metod v kvantové teorii

2.1 Variační metoda

Variační princip, funkcionál energie, variační kritérium kvality zkušební vlnové funkce. Příklady použití.

2.2 Stacionární poruchová teorie

Vlastní problém, neporušený systém a poruchové řady. Poruchová teorie prvního řádu pro nedegenerované diskrétní spektrum. Příklady použití.

2.3 Nestacionární poruchová teorie

Pravděpodobnost přechodu systému do jiného stavu, Fermiho pravidlo.

2.4 Bornovo-Oppenheimerovo přiblížení

Hamiltonián soustavy jader a elektronů, separace jaderných a elektronových proměnných, nadplocha potenciální energie.

3 Funkcionál hustoty

3.1 Elektronová hustota

Hustota pravděpodobnosti výskytu částice, elektronová hustota.

3.2 Thomasův-Fermiho model

Elektronový problém, přiblížení nehybných jader, aproximace nezávislých elektronů, princip výlučnosti. Aproximace středního pole. Homogenní elektronový plyn. Thomasův-Fermiho model.

3.3 Funkcionál

Celková energie jako funkce elektronové hustoty. Funkcionál a jeho vlastnosti.

4 Kohnovy-Shamovy rovnice

4.1 Teorémy Hohenberga a Kohna

1. Hohenbergův-Kohnův teorém a jeho důkaz. 2. Hohenbergův-Kohnův teorém a jeho důkaz.

4.2 Kohnovy-Shamovy rovnice

Přibližné nalezení funkcionálu hustoty, použití Kohnových-Shamových orbitalů, Kohnovy-Shamovy rovnice, Kohnův-Shamův funkcionál a varianční princip. Iterativní řešení rovnic.

4.3 Rozšíření na spinově polarizované systémy

5 Výměna a korelace v teorii funkcionálu hustoty

5.1 Aproximace lokální hustoty

Aproximace lokální hustoty (LDA), výměnná část z homogenního elektronového plynu, korelace Ceperley a Alder, parametrizace VWN. Rozšíření o spin (LSDA). Vlastnosti, trendy a limitace LDA a LSDA.

5.2 Gradientní korekce

Rozvoj výměnně-korelační energie, gradient hustoty, zobecněná gradientní aproximace (GGA). Funkcionál Langreth-Mehl, BLYP, PBE a jeho revize. Vlastnosti, trendy a limitace GGA.

5.3 Meta-GGA funkcionály

Laplacián hustoty, meta-GGA funkcionály, funkcionál TPSS, SCAN a další funkcionály používané v chemii. Vlastnosti, trendy a limitace mGGA.

6 Další praktické funkcionály hustoty

6.1 Hybridní funkcionály

Nelokality. Hybridní přístupy HF-KS, hybridní funkcionály, funkcionál B3LYP. Přesná výměna (EXX), funkcionál PBE0.

6.2 Separace rozsahu působení komponent

Coulombická interakce, chybová funkce. Hybridní funkcionály separované rozsahem působení, funkcionál HSE (HSE03, HSE06) a další. Hybridní funkcionály korigované ve vzdálených oblastech, funkcionál CAM-B3LYP a LC- ω PBE. Mnohparametrové funkcionály a role databází.

6.3 Dvojitě hybridní funkcionály

Dvojitě hybridní funkcionály, B2PLYP, PBE0-DH.

6.4 Dynamicky počítaný rozsah působení komponent

Dielectric-dependent hybrid (DDH) funkcionály, RS-DDH, DD-RSH-CAM, double screened hybrid (DSH) funkcionál.

7 Disperzní interakce a nelokální funkcionály

7.1 Disperzní interakce

Disperzní interakce, dosah, limitace tradiční teorie funkcionálu hustoty.

7.2 Empirické korekce disperzní interakce

Silová pole pro disperzní interakce, tlumicí funkce. Párová silová pole D2 a D3, dispersní koeficienty a tlumicí funkce závislé na hustotě – přístupy TS a TS+SCS. Mnohočásticové disperzní příspěvky.

7.3 Nelokální vdW funkcionály

Nelokální funkcionály, přístup vdW-DF, optimalizované nelokální funkcionály.

8 Kvazičásticové korekce a excitované stavy

8.1 Přiblížení Greenovy funkce: GW aproximace

Jednočásticová Greenova funkce, operátor vlastní energie, stíněná Coulombická interakce, praktické řešení.

8.2 Time-dependent DFT

Teorém Runge–Gross, linearizovaná verze TD-DFT, Casidova rovnice.

8.3 Betheho-Salpeterova rovnice

9 Další přístupy v moderní teorii funkcionálu hustoty

9.1 Silná korelace: DFT+U, DMFT

Empirický Hubbardův Hamiltonián, DFT+U ve variantách Liechtenstein a Dudarev, možnosti výpočtu parametru U z lineární odezvy.

9.2 Aproximace náhodných fází (RPA)

9.3 Klasifikace funkcionálu hustoty

10 Praktické postupy u periodických materiálů, pseudopotenciály, báze