

دروس پیشنهادی:	نظری	جبرائی	نوع واحد: تخصصی-اختیاری	تعداد واحد: ۳	عنوان درس به فارسی: نظریه تابعی چگالی و کاربردهای آن		
	عملی						
	نظری	پایه				تعداد ساعت: ۴۸	عنوان درس به انگلیسی: Density Functional Theory: method and applications
	عملی						
	نظری	الزامی					
	عملی						
	نظری	اختیاری					
	عملی						

آموزش تکمیلی عملی: دارد ندارد کارگاه آزمایشگاه سمینار سفر علمی

اهداف کلی درس: آشنایی با نظریه تابعی چگالی

سرفصل مطالب:

معرفی سیستم بس الکترونی، تقریب هارتری، هارتری فوک، برهم کنش پیکربندی (Configuration interaction)، مدل توماس-فرمی، تعمیم مدل توماس-فرمی، قضایای هوهنبرگ-کوهن، معادلات کوهن شم، تقریب چگالی موضعی (LSDA)، تقریب گرادیان‌های تعمیم یافته (GGA)، برهم کنش قوی در نظریه تابعی چگالی (LSDA+U)، نظریه تابعی چگالی وابسته به زمان، کاربردهای نظریه تابعی چگالی، نقاط ضعف و قوت نظریه تابعی چگالی، و رای نظریه تابعی چگالی



بخش عملی:

روش ارزیابی:

ارزشیابی مستمر	میان ترم	آزمون های نهایی	پروژه
	+	آزمون های نوشتاری: + عملکردی:	

منابع:

- Density – Functional Theory of Atoms and Molecules, R.G. Parr and W. Yang, Oxford University Press, 1989
- Density Functional Theory: An Approach to the Quantum Many _ body Problems, R.M. Dreizler and E. K. U. Gross, Springer, 1991
- Modern Density Functional Theory, J. M. Seminario, Elsevier, 1995
- Strong Coulomb Correlations in Electronic Structure Calculations, V.I. Anisimov, Gordon and BreacScience Publishers, 2000