

Табела 5.1 Спецификација предмета на студијском програму докторских студија

Назив предмета: Теорија функционала густине		
Наставник или наставници: Жељко Шљиванчанин		
Статус предмета: изборни		
Број ЕСПБ: 15		
Услов: Квантна механика (основне студије)		
Циљ предмета Упознавање са основама теорије функционала густине (DFT), неопходних за истраживачки рад у областима савремене физике које почивају на примени овог метода.		
Исход предмета Разумевање најзначајнијих идеја метода теорије функционала густине, предности у односу на алтернативне методе описа система интерагујућих електрона, основних аспеката практичне примене метода и увид у ограничења када је у питању његова примена.		
Садржај предмета <i>Теоријска настава</i> 1. Теореме Хоенберга и Кона. 2. Кон-Шамове једначине. 3. Најзначајнији функционали изменско-корелационе енергије. 4. Самоусаглашена процедура решавања Кон-Шамове једначине 5. „All-electron“ методи и метод псеудопотенцијала. 6. Избор базиса при примени теорије функционала густине: равни таласи и локализоване орбитале. <i>Практична настава</i>		
Препоручена литература 1. J. Toulouse, Introduction to density functional theory (Universite Pierre et Marie Curie et CNRS, Paris, 2017). 2. K. Burke, The ABC of DFT. (University of California, 2007). 3. R. M. Martin, Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods. (Cambridge University Press, 2004).		
Број часова активне наставе	Теоријска настава:	Практична настава:
Методе извођења наставе Консултације и семинари.		
Оцена знања (максимални број поена 100) Домаћи задаци 50, семинар 50.		
Начин провере знања могу бити различити : (писмени испити, усмени испт, презентација пројекта, семинари итд.....		
*максимална дужна 1 страница А4 формата		

Table 5.1 Specification of subjects in the doctoral studies study program

Name of the subject: Density Functional Theory		
Teacher(s): Željko Šljivančanin		
Status of the subject: elective		
Number of ECTS points: 15		
Condition: Quantum Mechanics (undergrad)		
Goal of the subject Introduction to the basics of density functional theory (DFT), necessary for conducting research in the fields of modern physics that are based on the application of this method.		
Outcome of the subject To understand the essential concepts of the method, advantages of the density functional theory compared to alternative methods used to describe systems of interacting electrons, the basics of applied DFT and awareness of the limitations of the method.		
Content of the subject <i>Theoretical lectures</i> 1. The Hohenberg-Kohn theorems. 2. The Kohn-Sham equations. 3. The most important exchange-correlation functionals. 4. Self-consistent procedure to solve the Kohn-Sham equations. 5. All-electron and pseudopotential methods. 6. The basis set: plane waves and localized orbitals. <i>Practical lectures</i>		
Recommended literature 1. J. Toulouse, Introduction to density functional theory (Universite Pierre et Marie Curie et CNRS, Paris, 2017). 2. K. Burke, The ABC of DFT. (University of California, 2007). 3. R. M. Martin, Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods. (Cambridge University Press, 2004).		
Number of active classes	Theory:	Practice:
Methods of delivering lectures Consultations, seminars		
Evaluation of knowledge (maximum number of points 100) Home-work exercises 50, seminars 50		
Weays of testing the knowledge may vary: (written tests, oral exam, project presentation, seminars ets.....		
*maximum length 1 A4 page		