Modulbezeichnung	Kurzbezeichnung
Computational Materials Science (DFT)	11-CMS-161-m01

Modulverantwortung	anbietende Einrichtung
Geschäftsführende Leitung des Instituts für Theoretische Physik und Astrophysik	Fakultät für Physik und Astronomie

ECTS	Bewertungsart	zuvor bestandene Module
8	numerische Notenvergabe	--

Moduldauer	Niveau	weitere Voraussetzungen
1 Semester	weiterführend	--

Inhalte

1. Dichtefunktionaltheorie (DFT)
2. Wannierfunktionen und lokalisierte Basissysteme
3. Numerische Auswertung topologischer Invarianzen
4. Hartree-Fock und statische Molekularfeldtheorie
5. Vielteilchen-Rechenmethoden für Festkörpertheorien
6. Das Anderson-Impurity-Modell (AIM) und Kondo-Physik
7. Dynamische Molekularfeldtheorie (DMFT)
8. DFT + DMFT Methoden zur realistischen Behandlung von Festkörpern
9. Stark korrelierte Elektronensysteme

Qualifikationsziele / Kompetenzen

Neben der theoretischen Behandlung dieser Themen finden "hands-on" Übungen im CIP-Pool statt. Die Teilnehmer werden in die Benutzung von DFT-Softwarepaketen wie z.B. VASP oder Wien2k eingeführt, sowie der Konstruktion maximal lokalisierter Wannierfunktionen durch Projektion der DFT-Ergebnisse auf Atomorbitale mit der Software wannier90. Die Studenten lernen außerdem, wie man Vielteilchen-Lösungen des AIMs erstellt und betrachten dessen Grenzfälle, wie z.B. ds Kondo-Regime. Impurity-Solver wie exakte Diagonalisierung oder Continous-time Quantum Monte Carlo werden benutzt, um die Selbstkonsistenzgleichungen der dynamischen Molekularfeldtheorie (DMFT) zu lösen. Diese Schritte sind notwendig, um den Höhepunkt der Vorlesung zu erreichen: eine DFT-DFMT Rechnung eines stark korrelierten Übergangsmetalloxids, wie SrVO3.

Lehrveranstaltungen (Art, SWS, Sprache sofern nicht Deutsch)

V (4) + R (2)
Veranstaltungssprache: Deutsch oder Englisch

Erfolgsüberprüfung (Art, Umfang, Sprache sofern nicht Deutsch / Turnus sofern nicht semesterweise / Bonusfähigkeit sofern möglich)

Klausur (ca. 90-120 Min.) oder mündliche Einzelprüfung (ca. 30 Min.) oder mündliche Gruppenprüfung (2 TN, ca. 30 Min. je TN) oder Projektbericht (ca. 8-10 S.) oder Referat/Vortrag (ca. 30 Min.).
Sofern eine Klausur als Prüfungsform festgelegt wurde, kann diese in eine mündliche Einzel- bzw. Gruppenprüfung geändert werden. Dies ist spätestens vier Wochen vor dem ursprünglich festgesetzten Klausurtermin von der Dozentin bzw. dem Dozenten anzukündigen.
Prüfungsturnus: im Semester der LV und im Folgesemester
Prüfungssprache: Deutsch und/oder Englisch

Platzvergabe

--

weitere Angaben

--

Arbeitsaufwand

240 h

Lehrturnus

k. A.

Bezug zur LPO I
--
Verwendung des Moduls in Studienfächern
Master (1 Hauptfach) Mathematik (2016) Master (1 Hauptfach) Physik (2016) Master (1 Hauptfach) Mathematische Physik (2016) Master (1 Hauptfach) Computational Mathematics (2016) Master (1 Hauptfach) Funktionswerkstoffe (2016) LA Master Gymnasium MINT-Lehramt PLUS im Elitenetzwerk Bayern (ENB) (2016) Zusatzstudium MINT-Lehramt PLUS im Elitenetzwerk Bayern (ENB) (2016) Master (1 Hauptfach) Computational Mathematics (2019) Master (1 Hauptfach) Mathematik (2019) Master (1 Hauptfach) Physik (2020) LA Master Gymnasium MINT-Lehramt PLUS im Elitenetzwerk Bayern (ENB) (2020) Zusatzstudium MINT-Lehramt PLUS im Elitenetzwerk Bayern (ENB) (2020) Master (1 Hauptfach) Mathematische Physik (2020) Master (1 Hauptfach) Computational Mathematics (2022) Master (1 Hauptfach) Funktionswerkstoffe (2022) Master (1 Hauptfach) Mathematik (2022) Master (1 Hauptfach) Mathematische Physik (2022) Master (1 Hauptfach) Computational Mathematics (2024) Master (1 Hauptfach) Mathematik (2024)