

<b>Modulbezeichnung</b>		<b>Kurzbezeichnung</b>
Computational Materials Science (DFT)		11-CMS-161-m01
<b>Modulverantwortung</b>		<b> anbietende Einrichtung</b>
Geschäftsführende Leitung des Instituts für Theoretische Physik und Astrophysik		Fakultät für Physik und Astronomie
<b>ECTS</b>	<b>Bewertungsart</b>	<b>zuvor bestandene Module</b>
8	numerische Notenvergabe	--
<b>Moduldauer</b>	<b>Niveau</b>	<b>weitere Voraussetzungen</b>
1 Semester	weiterführend	--
<b>Inhalte</b>		
<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Dichtefunktionaltheorie (DFT)</li> <li>2. Wannierfunktionen und lokalisierte Basissysteme</li> <li>3. Numerische Auswertung topologischer Invarianzen</li> <li>4. Hartree-Fock und statische Molekularfeldtheorie</li> <li>5. Vielteilchen-Rechenmethoden für Festkörpertheorien</li> <li>6. Das Anderson-Impurity-Modell (AIM) und Kondo-Physik</li> <li>7. Dynamische Molekularfeldtheorie (DMFT)</li> <li>8. DFT + DMFT Methoden zur realistischen Behandlung von Festkörpern</li> <li>9. Stark korrelierte Elektronensysteme</li> </ol>		
<b>Qualifikationsziele / Kompetenzen</b>		
<p>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 Wienzk 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 Continuous-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-DMFT Rechnung eines stark korrelierten Übergangsmetalloxids, wie SrVO<sub>3</sub>.</p>		
<b>Lehrveranstaltungen</b> (Art, SWS, Sprache sofern nicht Deutsch)		
V (4) + R (2) Veranstaltungssprache: Deutsch oder Englisch		
<b>Erfolgsüberprüfung</b> (Art, Umfang, Sprache sofern nicht Deutsch / Turnus sofern nicht semesterweise / Bonusfähigkeit sofern möglich)		
<p>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 vom Dozenten bzw. der Dozentin anzukündigen.          Prüfungsturnus: im Semester der LV und im Folgesemester          Prüfungssprache: Deutsch und/oder Englisch</p>		
<b>Platzvergabe</b>		
--		
<b>weitere Angaben</b>		
--		
<b>Bezug zur LPO I</b>		
--		
<b>Verwendung des Moduls in Studienfächern</b>		
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)