

<b>Modulbezeichnung</b>		<b>Kurzbezeichnung</b>
Computational Materials Science (DFT)		11-CMS-Int-201-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 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 Continuous-time Quantum Monte Carlo werden benutzt, um die Selbstkonsistenzgleichungen der dynamischen Molekularfeldtheorie (DMFT) zu lösen.</p>		
<b>Lehrveranstaltungen</b> (Art, SWS, Sprache sofern nicht Deutsch)		
V (4) + R (2) Veranstaltungssprache: Englisch		
<b>Erfolgsüberprüfung</b> (Art, Umfang, Sprache sofern nicht Deutsch / Turnus sofern nicht semesterweise / Bonusfähigkeit sofern möglich)		
<p>a) Klausur (ca. 90-120 Min.) oder b) mündliche Einzelprüfung (ca. 30 Min.) oder c) mündliche Gruppenprüfung (2 TN, je ca. 30 Min.) oder d) Projektbericht (ca. 8-10 S.) oder e) 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.          Prüfungssprache: Englisch          Prüfungsturnus: im Semester der LV und im Folgesemester</p>		
<b>Platzvergabe</b>		
--		
<b>weitere Angaben</b>		
--		
<b>Bezug zur LPO I</b>		
--		
<b>Verwendung des Moduls in Studienfächern</b>		
Master (1 Hauptfach) Physics International (2020)		