

3MD6010 - Théorie fonctionnelle de la densité

Responsables : **Erick HERBIN , Pietro CORTONA**

Langues d'enseignement : **FRANCAIS**

Campus où le cours est proposé : **CAMPUS DE PARIS - SACLAY**

Nombre d'heures d'études élèves (HEE) : **40**

Nombre d'heures présentielles d'enseignement (HPE) : **24**

Année académique : **2024-2025**

Niveau avancé : **non**

Présentation, objectifs généraux du cours :

La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) est la méthode la plus largement utilisée pour faire des calculs de structure électronique sur de systèmes complexes. Ce cours permettra aux élèves d'appréhender les fondements de la théorie et d'avoir une connaissance critique des approximations les plus couramment utilisées.

Période(s) du cours (n° de séquence ou hors séquence) :

SM11

Prérequis :

Mécanique Quantique telle qu'on l'apprend en première année.

Plan détaillé du cours (contenu) :

Compléments de mécanique quantique

- Méthode variationnelle, rappels et compléments.
- Atome d'hélium : état fondamental et premier état excité. États de singulet et de triplet.
- Moment cinétique en tant que générateur des rotations.
- Atomes complexes : couplage LS et jj. Interaction spin-orbite.

Théorie de la fonctionnelle de la densité

- Théorème de Hohenberg et Kohn.
- Théorie de Kohn et Sham.
- Problème de la V-représentabilité et théorie de Levy.
- Approximation locale (LDA).
- Approximations du gradient généralisé (GGA).
- Fonctionnelles hybrides.

Organisation de l'évaluation :

Ça dépendra du nombre d'étudiants inscrits. Fort probablement il s'agira d'un exposé.

Moyens :

Cours magistraux

Acquis d'apprentissage visés dans le cours :

Connaissance des fondements de la théorie de la fonctionnelle de la densité.

Connaissance des principales d'approximations couramment utilisées, de leurs points de force et de leurs faiblesses.

Description des compétences acquises à l'issue du cours :

Students will be able to perform electronic structure calculations with a full understanding of what the computer is really doing.

Bibliographie :

Un bon ouvrage de mécanique quantique.

Parr and Yang, Density Functional Theory of Atoms and Molecules, Oxford University Press