

**Табела 5.1** Спецификација предмета на студијском програму докторских студија

<b>Назив предмета:</b> Компјутерско моделовање структурних и електронских особина материјала		
<b>Наставник или наставници:</b> Ненад Вукмировић		
<b>Статус предмета:</b> изборни		
<b>Број ЕСПБ:</b> 15		
<b>Услов:</b> Теорија кондензованог стања / Физика чврстог стања		
<b>Циљ предмета</b> Упознавање студената са теоријом функционала густине и њеним применама на израчунавање физичких величина чврстих тела.		
<b>Исход предмета</b> Овладавање теоријом функционала густине и апроксимацијама које се у оквиру ње користе. Оспособљавање студената за коришћење неког од стандардних програма за компјутерско моделовање материјала засновано на овом методу.		
<b>Садржај предмета</b> <i>Теоријска настава</i> Хамилтонијан чврстог тела. Борн-Опенхајмерова апроксимација. Хоенберг-Конове теореме. Кон-Шамове једначине. Апроксимације за изменско-корелациони функционал: апроксимација локалне густине, генерализована градијентна апроксимација, итд. Хелман-Фејнманова теорема. Преглед нумеричких имплементација у различитим базисима и постојећих рачунарских програма. Примене за рачунање структурних, електронских, механичких, топлотних и других особина материјала.  <i>Практична настава</i> Коришћење неког од постојећих рачунарских кодова (Abinit, Quantum Espresso,...) за прорачун: -константе решетке материјала. -зонске структуре материјала. -енергија фонона у материјалу. -еластичних константи материјала.		
<b>Препоручена литература</b> 1. F. Giustino, Materials Modelling using Density Functional Theory, Oxford University Press, 2014. 2. R. Martin, Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods, Cambridge University Press, Cambridge, 2004.		
Број часова активне наставе	Теоријска настава: 2 часа недељно	Практична настава: 2 часа недељно
<b>Методе извођења наставе</b> Предавања, рачунске вежбе, консултације, домаћи задаци.		
<b>Оцена знања (максимални број поена 100)</b> домаћи задаци 50, усмени испит 50		

**Table 5.1 Specification of subjects in the doctoral studies study program**

<b>Name of the subject:</b> Computational modelling of structural and electronic properties of materials		
<b>Teacher(s):</b> Nenad Vukmirović		
<b>Status of the subject:</b> elective		
<b>Number of ECTS points:</b> 15		
<b>Condition:</b> Solid State Physics		
<b>Goal of the subject</b> Introduction to density functional theory and its applications for calculations of physical properties in solid state.		
<b>Outcome of the subject</b> After the course the student will be familiar with density functional theory and the approximations that are used within it. The student will be capable of using some of the existing programs for computational modelling of materials based on density functional theory.		
<b>Content of the subject</b> <i>Theoretical lectures</i> Solid-state Hamiltonian. Born-Oppenheimer approximation. Hohenberg-Kohn theorems. Kohn-Sham equations. Approximation for exchange-correlation potential: local density approximation, generalized gradient approximation, etc. Hellmann-Feynman theorem. Overview of numerical implementations using various basis sets and existing computational codes. Applications for calculations of structural, electronic, mechanical, thermal and other properties of materials.  <i>Practical lectures</i> Application of some of the existing computational codes (Abinit, Quantum Espresso,...) for the calculation of: -the lattice constant of the material. -the band structure of the material. -phonon energies in the material. -the elastic constants of the material.		
<b>Recommended literature</b> 1. F. Giustino, Materials Modelling using Density Functional Theory, Oxford University Press, 2014. 2. R. Martin, Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods, Cambridge University Press, Cambridge, 2004.		
Number of active classes	Theory: 2 hours per week	Practice: 2 hours per week
<b>Methods of delivering lectures</b> Theoretical and practical lectures, tutorials, homeworks.		
<b>Evaluation of knowledge (maximum number of points 100)</b> homeworks 50, oral exam 50		