

<b>Teema</b>	<b>Reaalsete kristallide füüsikaliste omaduste arvutamine DFT meetodil.</b>
<b>Teema sobib</b>	Lõputööks magistriõppe üliõpilastele
<b>Kontaktisik</b>	Tallinn Tehnikaülikool, Küberneetika instituut, Füüsikaosakond, dots. Mihhail Klopov (II-123)
<b>Teema tutvustus</b>	<p>Mikroskoopilised kristalli omaduste arvutusmeetodid (ab-initio, molekulaardünaamika (MD)) on muutunud väga atraktiivseks seoses nende tähtsusega materjaliteaduses. <i>Ab-initio</i> arvutuste edu on seotud tihedusfunktsionaali teooriaga (<i>density functional theory</i> (DFT)), mis võimaldab saavutada suurt täpsust koos arvutusliku efektiivsusega ja ei nõua täiendavaid, katseliselt saadud parameetreid. On tekkinud võimalus materjalide omaduste ennustamiseks ainete elektronstruktuuri täpse arvutamise alusel. Seda tüüpi arvutused lubavad isegi hüpoteetiliste ainete omadusi uurida ilma reaalselt eksperimenti teostamata (nn. arvutuslikud katsed). <i>Ab-initio</i> arvutuste kasutamine on suure tähtsusega uute teooriate kontrollimisel ja ka eksperimendi kavandamisel materjaliteaduse erinevatel aladel. Magistritöö raames on arvutatakse reaalsete kristallide elektroonilised, foonon- ja optilised omadused DFT meetodil. Saab kasutada selle jaoks litsenseeritud tarvara „VASP” ja „Phonon”. Lisainfot saab siit:</p> <p><a href="https://en.wikipedia.org/wiki/Density_functional_theory">https://en.wikipedia.org/wiki/Density_functional_theory</a>  <a href="https://www.vasp.at/">https://www.vasp.at/</a></p>
<b>Nõuded kandidaadile</b>	Üldfüüsika kursus, kõrgem matemaatika kursus, tahkekeha füüsika, töö Linux keskkonnas ja Fortrani, Pythoni või C-tüüpi programmeerimiskeele tundmine