

SEMINARIUM RENTGENOWSKIE

Dnia 25.06.2013 r. o godz. 10.30, w Sali D Instytutu Fizyki PAN, odbędzie się seminarium rtg. na którym **prof. nadzw. dr hab. Józef Deniszczyk z Uniwersytetu Śląskiego z Katowic**, wygłosi referat p.t.:

„Obliczenia metodami ab initio diagramu stabilności fazowej roztworów stałych ZnSe-BeSe oraz CdSe-CdS”

Streszczenie:

Kwantowe obliczenia ab initio (z pierwszych zasad) stanowią obecnie jedno z ważniejszych narzędzi badawczych we współczesnych laboratoriach badań podstawowych, jak i w inżynierii materiałowej. Są niezastąpione we wspomaganiu interpretacji danych doświadczalnych, weryfikacji hipotez empirycznych, natomiast znajdują również zastosowanie w projektowaniu i badaniu właściwości fizycznych nowych, nieistniejących jeszcze materiałów. W szczególności, za pomocą metod ab initio możliwe jest wyliczenie diagramu fazowego T-x, niezbędnego przy projektowaniu nowych materiałów w postaci roztworów stałych.

Seminarium obejmuje prezentację podstaw teoretycznych metod kwantowych oraz niezbędnych przybliżeń stosowanych w obliczeniach diagramów stabilności fazowej roztworów stałych. Omówione będą: podstawy Teorii Funkcjonału Gęstości oraz procedury Kohna-Shama; metoda rozwinięcia klastrowego dla energii swobodnej w roztworach stałych oraz przybliżona metoda obliczeń wibracyjnej energii swobodnej.

Rezultaty obliczeń diagramu stabilności fazowej omówione zostaną na przykładzie półprzewodnikowych roztworów stałych: ZnSe-BeSe oraz CdSe-CdS.

Dr Iraida Demchenko