

Väitöstiedote

13.01.2020

Elektronirakenteen karkeistettu mallintaminen orbitaalivapaalla tiheysfunktionaaliteorialla

Väitöskirjan nimi	Density functional theory approximations from semiclassical considerations Tiheysfunktionaaliteorian approksimaatiota semiklassisesta lähestymistavasta
Väitöskirjan sisältö	<p>Laskennallinen materiaalfysiikka antaa meille mahdollisuuden tutkia materiaaleiden ominaisuuksia ja kehitellä uusia materiaaleja teoreettisten mallien avulla yhdessä kokeellisten tutkimuksien kanssa. Materiaalin elektronirakenteen määrittäminen on keskeisessä roolissa tutkittaessa niiden ominaisuuksia. Yksi menestyneimmistä teorioista elektronirakenteen mallintamisessa on tiheysfunktionaaliteoria, joka yleensä tarjoaa hyvän tasapainon laskennallisen tehokkuuden ja mallin tarkkuuden välillä.</p> <p>Tässä väitöskirjassa tutkittiin pääasiassa tiheysfunktionaaliteorian orbitaalivapaata approksimaatiota, joka karkeistaa elektronirakenteen kuvausta ottamalla huomioon kvanttimekaanisen Paulin periaatteen vain osittain huomioon (nk. semiklassinen approksimaatio). Orbitaalivapaat mallit ovat laskennallisesti kevyitä verrattuna raskaampaan, joskin tarkempaan Kohn-Sham malliin. Orbitaalivapaa malli mahdollistaa entistä suurempien systeemien mallintamisen, mutta rajoittava tekijä on nykyisten approksimaatioiden tarkkuus. Tutkimuksessa tarkastellaan kiinteän aineen lisäksi atomeja ja suurten atomilukujen rajaa parempien orbitaalivapaiden approksimaatioiden löytämiseksi.</p> <p>Työssä tutkitaan tiheysfunktionaaliteorialla myös boronilla dopattua Ga_2O_3 puolijohdemateriaalia, jolla on mahdollisia sovelluksia neutroni-ilmaisimien rakentamiseen.</p>
Väitöskirjan ala	Teknillinen fysiikka, laskennallinen materiaalfysiikka
Tohtorikoulutettava	Jouko Lehtomäki, DI
Väitöksen ajankohta	24.01.2020 klo 13
Paikka	Aalto-yliopiston perustieteiden korkeakoulun M1-sali, Otakaari 1, Espoo
Vastaväittäjä	Dr. Ing. Fabio Della Sala, IMM-CNR-Lecce & Center for Biomolecular Nanotechnologies@UNILE, Italian Institute of Technology
Kustos	Professori Patrick Rinke, Aalto-yliopiston perustieteiden korkeakoulu, teknillisen fysiikan laitos
Väitöskirjan verkko-osoite	-
Tohtorikoulutettavan yhteystiedot	Jouko Lehtomäki, p.0440170590, jouko.lehtomaki@aalto.fi