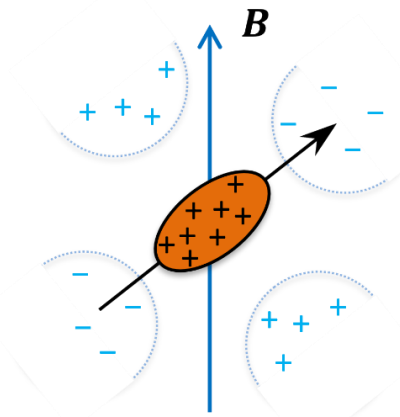
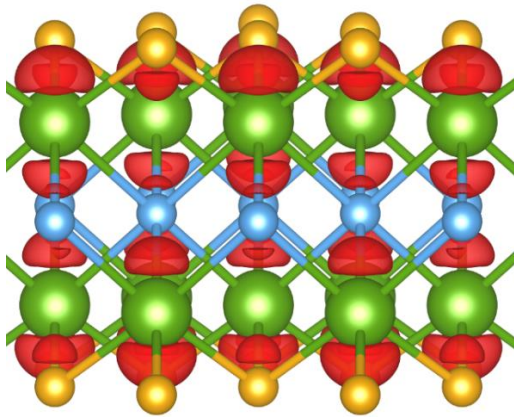


# Přesnost výpočtů EFG tenzoru a tenzoru chemického stínění v DFT (WIEN2k): vliv numerických parametrů a aproximací

Typ práce	SFG
Jazyk práce	česky / anglicky
Vedoucí	doc. RNDr. Vojtěch Chlan, Ph.D.
Kontakt	vojtech.chlan@matfyz.cuni.cz
Pracoviště	KFNT MFF UK (MFF Troja)
Klíčová slova	výpočty elektronové struktury; teorie funkcionálu hustoty (DFT), tenzor gradientu elektrického pole (EFG)
Časová náročnost	1 semestr / cca 100 hodin

Projekt se zaměřuje na systematické studium přesnosti výpočtu tenzoru gradientu elektrického pole (EFG) v rámci DFT kódu WIEN2k. Budou analyzovány vlivy numerických parametrů (např.  $RK_{max}$ , k-mřížka, volba báze) a fyzikálních aproximací (LDA/GGA) na výsledné hodnoty. Cílem je identifikovat klíčové faktory ovlivňující spolehlivost výpočtů a formulovat praktická doporučení.



## Cíl projektu

Cílem je kvantifikovat citlivost tenzoru gradientu elektrického pole (EFG) a tenzoru chemického stínění ( $\sigma$ ) na numerická nastavení a zvolené aproximace v DFT výpočtech. Projekt se zaměří na konvergenční studie a odhad systematických chyb. Výsledkem bude metodika pro spolehlivý výpočet NMR relevantních veličin.

## Co se naučíte

**Výpočetní fyzika:** základy DFT a metody LAPW ve WIEN2k.

**Technické dovednosti:** příprava a spouštění výpočtů na HPC (Metacentrum), práce s dávkovými úlohami, základy Linuxu, zpracování a analýza dat, konvergenční studie.

## Postup řešení projektu

- seznámení se s teorií funkcionálu hustoty (DFT), základní práce s WIEN2k
- testovací/pilotní výpočty jednoduchých systémů, výpočet tenzorů EFG a  $\sigma$
- systematická konvergenční studie ( $RK_{max}$ , k-body, báze)
- porovnání různých aproximací výměnně-korelačního potenciálu
- analýza výsledků a formulace doporučení

**Další informace** osobně nebo emailem