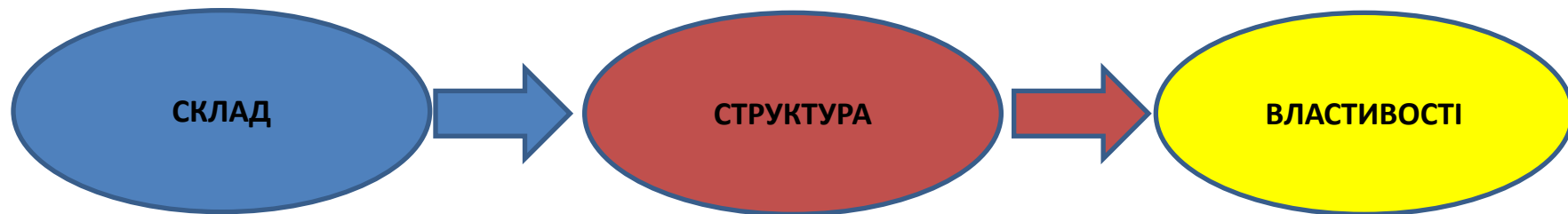


# Комп'ютерне моделювання електронних властивостей матеріалів



Олег Фея, к.ф-м.н

# КОМП'ЮТЕРНИЙ ДИЗАЙН МАТЕРІАЛІВ



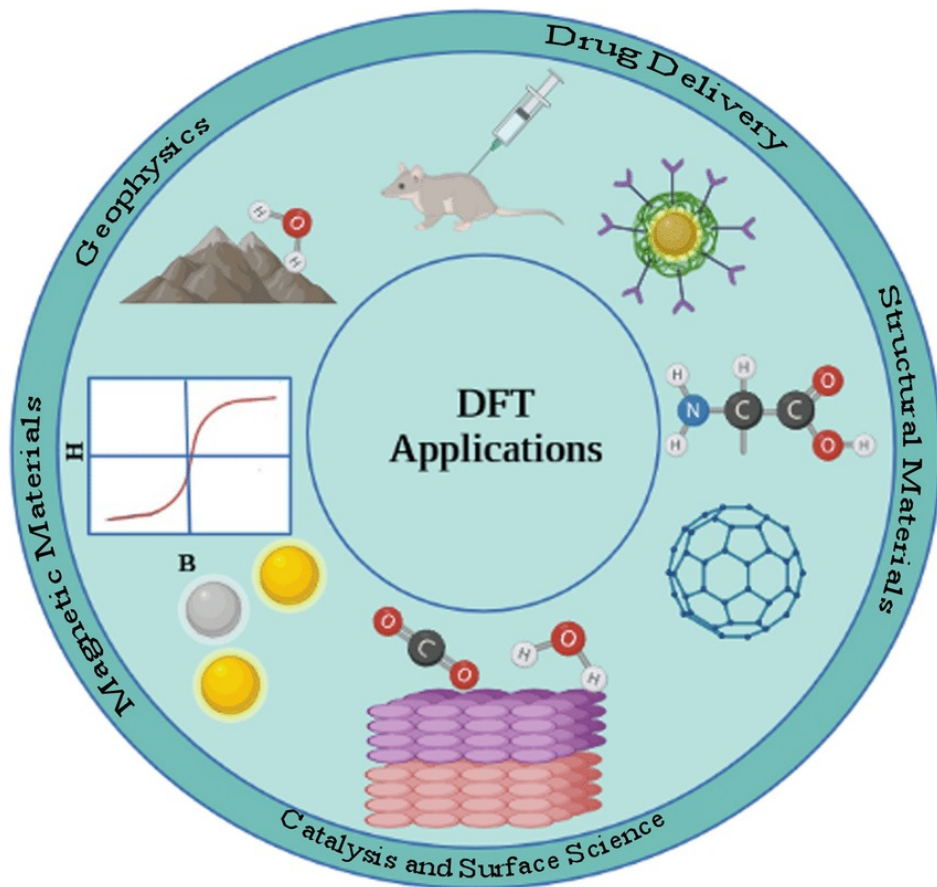
## ДОСЛІДНИЦЬКІ МЕТОДИ

Експеримент

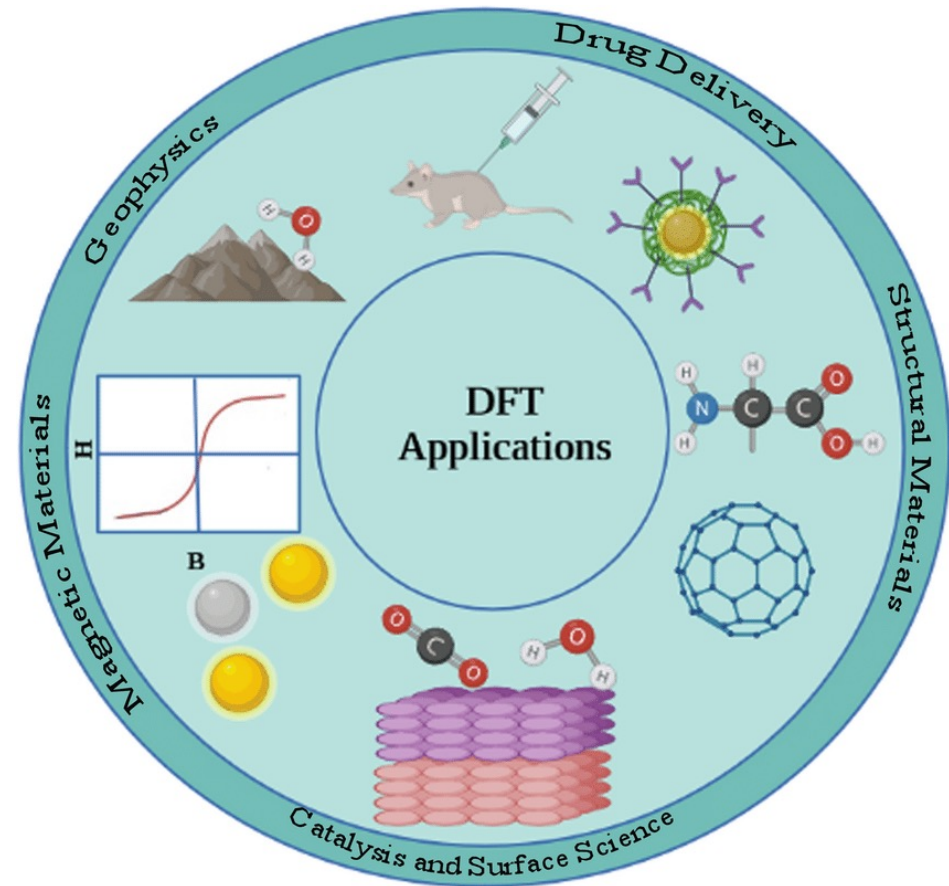
Розрахунки: теорія функціоналу густини (FPLO, VASP, Abinit, Wien2k),  
Еволюційні алгоритми (USPEX, CALLYPSO...)



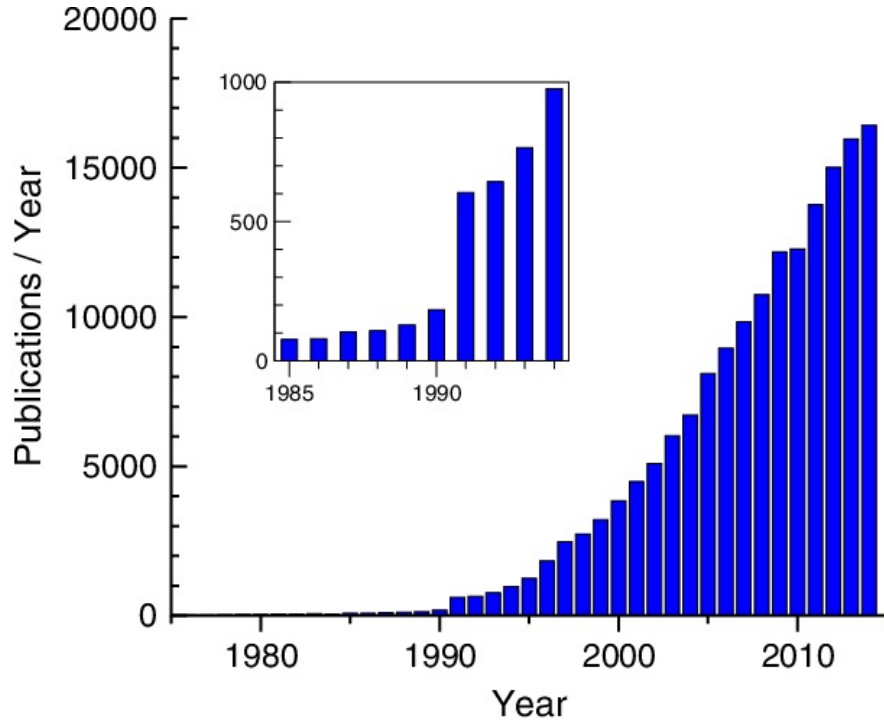
# ТЕОРІЯ ФУНКЦІОНАЛУ ГУСТИНИ (Density Functional Theory)



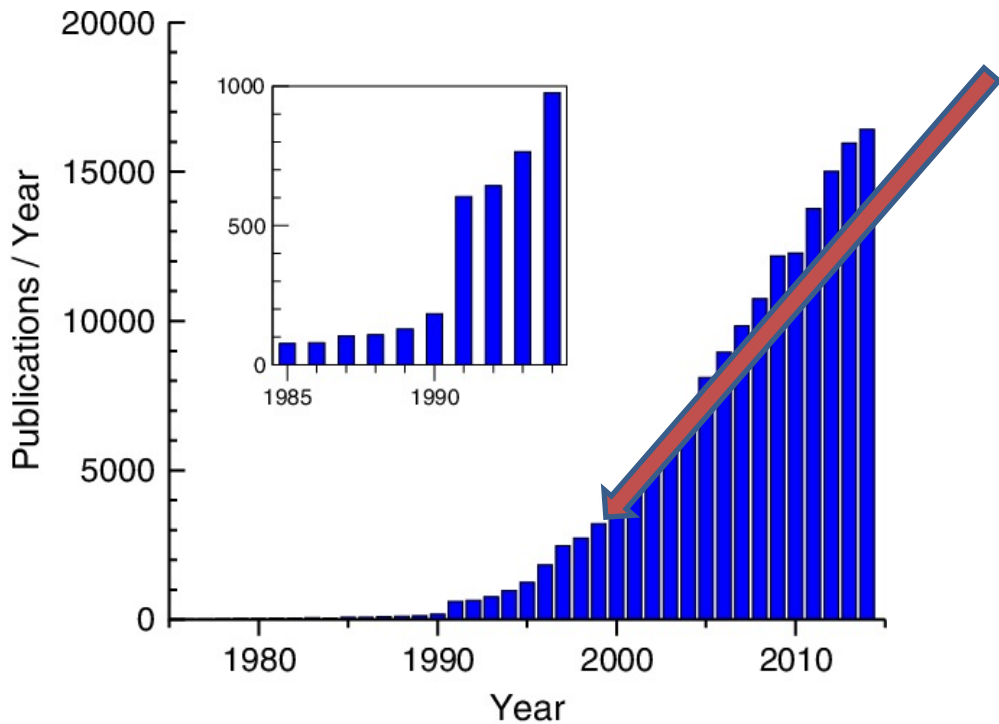
# ТЕОРІЯ ФУНКЦІОНАЛУ ГУСТИНИ (Density Functional Theory)



# ТЕОРІЯ ФУНКЦІОНАЛУ ГУСТИНИ (Density Functional Theory)



# ТЕОРІЯ ФУНКЦІОНАЛУ ГУСТИНИ (Density Functional Theory)

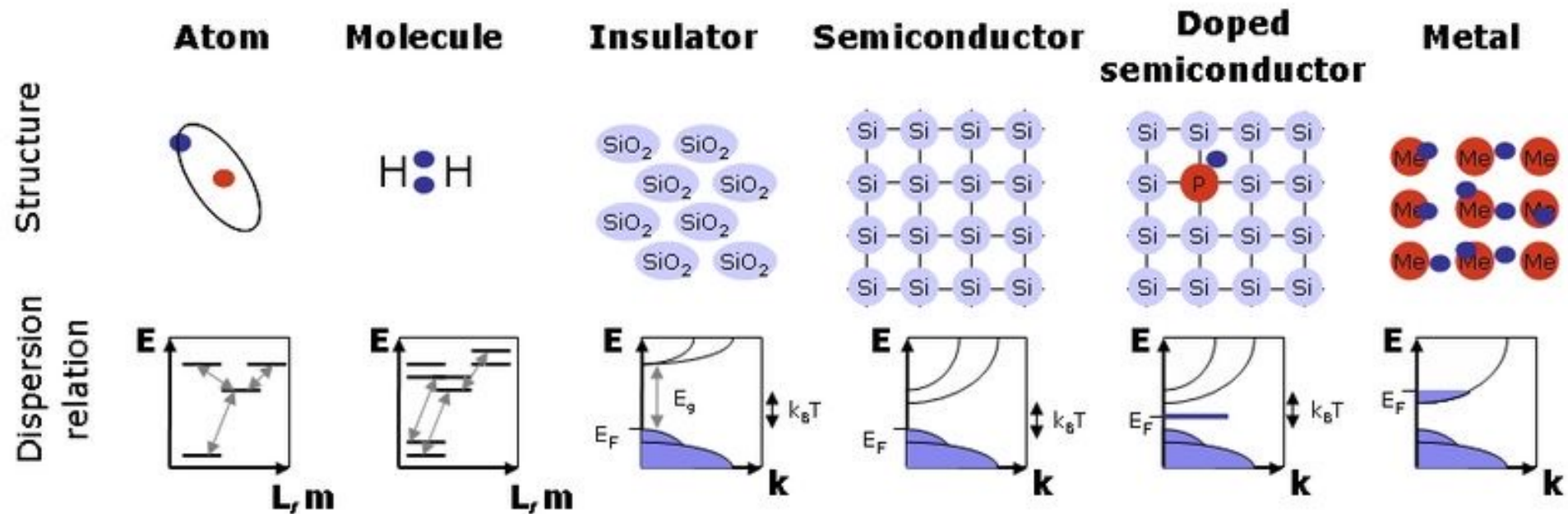


Вальтер Кон  
1923-2016



Хімія, 1998

# ЕЛЕКТРОННА СТРУКТУРА МАТЕРІАЛІВ



# ПЕРЕДБАЧЕННЯ НОВИХ СТРУКТУР

