



دانشگاه صنعتی شریف

دانشکده فیزیک برگزار می کند:



زنگ پژوهش

زمان

یکشنبه ۱۳۹۷/۸/۱۳

۱۳:۳۰ - ۱۴:۳۰

سخنران

نگار اشعری

دانشگاه صنعتی شریف، دانشکده فیزیک

عنوان سخنرانی

معادله شرودینگر در عمل!

چکیده

روزی را تصور کنید که پشت کامپیوتر می نشینید و با زدن کلید ورود ماده پیشرفته شما با همان خواص الکترونی خاص مد نظرتان طراحی می شود. هنوز در آن مرحله نیستیم ولی با شیب تندی به آن سمت به پیش میرویم. با وجود اینکه بیشتر کشفیات بشر نتیجه تفکر تحلیلی و بینش استنتاجی بوده است که از آزمایش های عملی به دست آمده است، غربالگری نظام مند توسط کامپیوترهایی که روز به روز سریع تر می شوند و می توانند میلیون ها ترکیب شیمیایی را در مدت کوتاهی مرور کنند بی شک موجب تسریع فرایند طراحی، ساخت و تجاری شدن مواد پیشرفته می شود. خوشبختانه هسته هوشمند مورد نیاز سال ها پیش تحت عنوان معادله شرودینگر در اختیار ما قرار گرفته است و تنها کار باقی مانده به کار بردن الگوریتم هایی است که این معادله را حتی الامکان سریعتر و دقیق تر حل کنند. در این سخنرانی با انتخاب موردی سلول های خورشیدی به نقش روش های حل ساختار الکترونی و بالاخص نظریه تابعی چگال در طراحی و بهینه سازی این سیستم ها می پردازیم.

مکان

تالار دکتر جناب

(آمفی تئاتر دانشکده فیزیک)