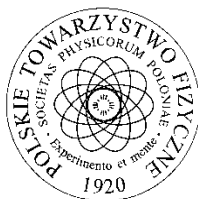




Dziekan Wydziału  
Matematyczno-Przyrodniczego  
i Dyrektor Instytutu Fizyki  
Akademii im. Jana Długosza  
w Częstochowie zapraszają  
**17 czerwca 2015 r. o godz. 12<sup>15</sup>**  
**do Audytorium – sala 1023**  
Al. Armii Krajowej 13/15



na

## Seminarium Wydziału Matematyczno-Przyrodniczego

na którym

**Dr Andrzej Biborski**  
**Akademickie Centrum Materiałów i Nanotechnologii,**  
**Akademia Górniczo-Hutnicza, Kraków**

przedstawi wykład:

## **Obliczenia typu *ab-initio* układów wodorowych w stanie skorelowanym**

Badania teoretyczne nad układami wodorowymi takimi jak układy molekuł, łańcuchy, stanowią punkt wyjścia do studiów nad zagadnieniem okrzykniętym osiemdziesiąt lat temu jako „Święty Graal fizyki wysokich ciśnień” - metalizacją wodoru. W moim wystąpieniu przedstawię zarys oryginalnej kwantowo-mechanicznej metody obliczeniowej Exact Diagonalization Ab Initio (EDABI) stosowanej z powodzeniem dla wspomnianych układów, którą sklasyfikować można jako tzw. metodę dokładną, opartą o formalizmy zarówno pierwszej jak i drugiej kwantyzacji.

W pierwszej części wykładu przedstawię zarys metody EDABI, zaznaczę aspekty złożoności obliczeniowej, wspomnę o jej implementacji programistycznej dedykowanej nowoczesnym układom klastrowym (superkomputerom). W drugiej części, przedstawię aplikację metody EDABI do modelowego układu wodorowego w którym zachodzą przejścia fazowe pomiędzy fazą molekularną a atomową na skutek przyłożonego ciśnienia (siły). Przedstawię złożoną topografię energii układu w funkcji parametrów strukturalnych oraz własności elektronowe odkrytych faz. (Andrzej Biborski)

**dr hab. Janusz Kapuśniak, prof. AJD**

Dziekan Wydziału Matematyczno-Przyrodniczego

**dr hab. Małgorzata Makowska-Janusik, prof. AJD**

Prodziekan Wydziału Matematyczno-Przyrodniczego ds. Nauki

**dr hab. Zdzisław Stępień, prof. AJD**

Dyrektor Instytutu Fizyki

**dr Wojciech Gruhn**

Sekretarz Seminarium