

Contact person: CS III dr. Diana Benea (diana.benea@phys.ubbcluj.ro)

Calcul de structura electronica

Infrastructura de calcul disponibila

-8 computere cu procesor Pentium IV, hard disk 80 GB, 2 G memorie RAM

Programe de calcul:

- codul de calcul SPRKKR Muenchen, versiune 7.0 version, cu interfata grafica *xband*
- codul de calcul TB-LMTO

Domenii de interes

Calcul de structura electronica de benzi

- Investigarea proprietatilor electronice si magnetice ale metalelor cu pamanturi rare si elemente 3d, ale compusilor intermetalici, magnetilor permanenti, materialelor magnetice moi si ale compusilor half-metalici.
- **Spectroscopie**
- Calcule *ab initio* ale XMCD in spectrele de absorbtie (XAS).
- Calcule *ab initio* pentru descrierea spectrelor de fotoemisie in banda de valenta (VB-XPS).
- Calcule *ab initio* pentru descrierea imprastierii Compton pentru materiale magnetice (metale si aliaje).
- Calcule *ab initio* pentru descrierea densitatii momentului electronic. Analiza spectrelor experimentale 2D-ACAR obtinute in experimentele de anihilare pozitronica.

