

Obiective generale

Calculare și dezvoltări metodologice în modelarea proprietăților optice ale sistemelor lantanidice.

Obiective, pentru etapa 2022.

De la modele la materiale.

Mutații și extensii în strategiile hibride de calcul DFT (Teoria Densității Funcționale) și unde plane (PW), către o nouă generație de modele de câmp al liganzilor (LF).

Act 1.1 - Calculare non-standard cu unde plane (PW) implicând populații orbitale fracționare ale benzilor de tip f.

Act 1.2 -Elaborarea de noi modele de câmp al liganzilor.

-Participare la conferințe

Obiective, pentru etapa 2023.

Noi perspective și investigații prospective în materialele fosforescente pe baza de lantanide. Studii de caz selectate.

Calculare de funcții de undă multi-determinant pe modele de tip cluster cu lantanide.

Spre o nouă generație de modele de câmp al liganzilor.

Act 2.1. Dezvoltări metodologice în strategiile de modelare DFT & LF. Calculare DFT+U+J, estimarea efectelor cuplajului spin-orbita (SO) în calculare DFT&LF

Act 2.2 Calculare de bandă pe rețele lantanidice selectate dintre oxizi, halogenuri, silicați sau fosfați. Coroborarea rezultatelor DFT cu modelarea LF-multistrat a proprietăților optice.

Act 2.3 Calculare de tip WFT multiconfigurațional pe structuri moleculare și de cluster. Adaptarea sistemelor cluster după rețelele materialelor lantanidice fosforescente. Proceduri non-rutina de asamblare a orbitalelor moleculare din componente de fragment.

4 articole ISI

1 capitol de carte

Participări la conferințe