



## ΙΔΡΥΜΑ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΚΑΙ ΕΡΕΥΝΑΣ

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ  
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ  
Οδός Σταδίου, Ρίο, Τ.Θ. 1414, 265 04 Πάτρα  
Τηλ.: 2610 965 300 & 3, Fax: 2610 990 987  
[www.iceht.forth.gr](http://www.iceht.forth.gr)

### ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ

- ΟΜΙΛΗΤΗΣ:** Professor Tomasz A. Wesolowski  
University of Geneva, Dept. of Physical Chemistry
- ΘΕΜΑ:** **The kinetic energy as the functional of electron density – challenge for theory and practical benefits in computer modeling of soft condensed matter**
- ΤΟΠΟΣ:** Αίθουσα Σεμιναρίων ΙΤΕ/ΕΙΧΗΜΥΘ
- ΗΜΕΡΟΜΗΝΙΑ:** Τρίτη, 16 Νοεμβρίου 2004
- ΩΡΑ:** 19:00

### ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Outline of the talk:

- I. Subsystem based formulation of density functional theory
- II. New theoretical challenge: approximation of the non-additive kinetic energy as a functional of two electron densities
- III. Review of our studies of the non-additive kinetic energy bi-functional
- IV. Practical applications (solvated chromophores, electronic structure of metal impurities in solids, interaction induced changes of electronic structure).