ŋqdqɏeɎ bɆ dədɆbɎɜə d ɕɔɑbɔɏ Ɉqddɏqɏè

УДК 538(9)
ББК 22.37
К 84

Рецензент – кандидат физико-математических наук Д.А. Кислов

Кручинин, Н.Ю.

К 84 Метод функционала плотности для расчета свойств молекул и твердых тел: учебное пособие / Н.Ю. Кручинин. – Оренбургский гос. ун-т. – Оренбург: ОГУ, 2017. – 128 с.
ISBN 978-5-7410-1739-5

В учебном пособии рассматривается метод функционала плотности и его применение для расчета свойств молекул и твердых тел.

Учебное пособие предназначено для обучающихся по образовательным программам высшего образования по направлениям подготовки 03.03.03 Радиофизика 03.04.02 Физика для изучения дисциплин «Математическое моделирование физических процессов, «Основы молекулярной электроники и фотоники».

УДК 538(9)
ББК 22.37

ISBN 978-5-7410-1739-5

© Кручинин Н.Ю., 2017
© ОГУ, 2017

ŋqdqɏeɎ bɆ dədɆbɎɜə d ɕɔɑbɔɏ Ɉqddɏqɏè

ŋqdqɏeɎ bɆ dədɆbɎɜə d ɕɔɑbɔɏ Ɉqdɖɏqɏè

Содержание

Аннотация 5

Введение.......... 5

Предисловие.......... 6

1 Теория функционала плотности 7

1.1 Аппроксимация Томаса-Ферми-Дирака 7

1.2 Теоремы Хоэнберга-Кона 8

1.3 Метод Кона-Шэма 12

1.4 Функционалы для обмена и корреляции 20

1.5 Решение уравнений Кона-Шэма 29

1.6 Псевдопотенциалы 34

1.7 Плоские волны и сетки 37

1.8 Электронные спектры в теории функционала плотности 44

2 Нестационарная теория функционала плотности (TDDFT) 46

2.1 Метод расчета оптического линейного отклика с использования нестационарной теории функционала плотности 48

2.2 Вычислительные методы 52

2.3 Метод Штернхаймера.......... 61

2.4 Метод Касиды.......... 67

3 Приближение GW. Уравнение Бете-Солпитера.......... 70

3.1 Приближение GW.......... 70

3.2 Уравнение Бете-Солпитера.......... 79

4 Неэмпирическая молекулярная динамика.......... 85

4.1 Молекулярная динамика Эренфеста.......... 90

4.2 Молекулярная динамика Борна-Оппенгеймера.......... 91

4.3 Молекулярная динамика Кара-Парринелло.......... 92

5 Программный комплекс ABINIT.......... 95

5.1 Начало работы.......... 95

ŋqdqɏeɎ bɆ dədɆbɎɜə d ɕɔɑbɔɏ Ɉqdɖɏqɏè

5.2 Основные переменные…………………………………………… 96
5.3 Примеры……………………………………………………….... 104
Заключение...…………………………………………………….... 124
Список использованных источников 125