

სიმკვრივის ფუნქციონალის თეორია: პრინციპები, თვითშეთანხმებულობა და პრაქტიკული გამოყენება

ზაალ მაჭავარიანი^ა, თამარ ჭელიძე^ბ

ელ-ფოსტა: zaal.machavariani@tsu.ge

^ა ატომისა და ატომბირთვის ფიზიკის კათედრა, ზუსტი და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა ფაკულტეტი, ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი, ჭავჭავაძის 3 თბილისი

^ბ კონდენსირებული გარემოს ფიზიკის კათედრა, ზუსტი და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა ფაკულტეტი, ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი, ჭავჭავაძის 3 თბილისი

სიმკვრივის ფუნქციონალის თეორია (DFT) გახდა ერთ-ერთი ყველაზე ფართოდ გამოყენებადი გამოთვლითი ჩარჩო მასალათმცოდნეობაში, ქიმიასა და მყარი სხეულების ფიზიკაში, რაც საშუალებას იძლევა წინასწარ განისაზღვროს ელექტრონული სტრუქტურა და მასთან დაკავშირებული ფიზიკური თვისებები პირველადი პრინციპების საფუძველზე.

ამ მოხსენებაში ჩვენ მიმოვიხილავთ DFT-ის ფუნდამენტურ კონცეფციებს, დავიწყებთ მრავალელექტრონიანი შრედინგერის განტოლებით და იმ საკვანძო მოსაზრებით, რომ მრავალელექტრონიანი სისტემის ძირითადი მდგომარეობის თვისებები ცალსახად განისაზღვრება მისი ელექტრონული სიმკვრივით. DFT-ის ცენტრალური ნაწილია თვითშეთანხმებული ველის (SCF) პროცედურა, რომლის დროსაც ელექტრონული სიმკვრივე და ეფექტური პოტენციალი იტერაციულად იხვეწება კრებადობის მიღწევამდე.

ჩვენ განვმარტავთ, თუ როგორ უზრუნველყოფს DFT-ის პრაქტიკული იმპლემენტაციები — როგორიცაა ბრტყელი ტალღის ბაზისური სიმრავლეები და ფსევდოპოტენციალები — რეალური მასალების ეფექტურ და ზუსტ გამოთვლებს. მოხსენება შეეხება გავრცელებულ მიახლოებებს (მაგალითად, გაცვლით-კორელაციურ ფუნქციონალებს), კრებადობის ზღურბლების როლს და იმას, თუ როგორ გამოიყენება სიმკვრივის შერევა (density mixing) და სხვა რიცხვითი სტრატეგიები სტაბილურობის მისაღწევად.

საილუსტრაციო მაგალითები აჩვენებს, თუ როგორ გამოიყენება DFT ფართოდ გავრცელებული პროგრამული უზრუნველყოფის მეშვეობით, რაც ხაზს უსვამს მის ძლიერ მხარეებსა და შეზღუდვებს. მსმენელები მიიღებენ მკაფიო კონცეპტუალურ წარმოდგენას DFT-ის ძირითად მექანიზმებზე.