

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Оренбургский государственный университет»
Кафедра радиофизики и электроники

Н.Ю. Кручинин

МЕТОД ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ. AB INITIO МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА

Рекомендовано к изданию Редакционно-издательским советом
федерального государственного бюджетного образовательного
учреждения высшего профессионального образования
«Оренбургский государственный университет» в качестве
методических указаний для студентов, обучающихся по
программам высшего профессионального образования по
направлению подготовки 011800.62 Радиофизика

Оренбург
2014

УДК 538(9)
ББК 22.37
К 84

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

Кручинин, Н.Ю.

К 84 Метод функционала плотности. Ab initio молекулярная динамика: методические указания к лабораторным работам / Н.Ю. Кручинин. – Оренбургский гос. ун-т. – Оренбург: ОГУ, 2014. – 67 с.

Методические указания содержат 5 лабораторных работ и методические указания к ним. В методическом указании представлено описание метода функционала плотности и ab initio молекулярной динамики, постановка задачи и порядок выполнения для лабораторных работ.

Методические указания предназначены для студентов направления 011800.62 «Радиофизика» для изучения дисциплины «Математическое моделирование физических процессов».

УДК 538(9)
ББК 22.37

© Кручинин Н.Ю., 2014
© ОГУ, 2014

Содержание

	Введение.....	4
1	Метод функционала плотности	5
1.1	Аппроксимация Томаса-Ферми-Дирака	5
1.2	Теоремы Хоэнберга — Кона	6
1.3	Метод Кона-Шама	10
1.4	Нестационарная теория функционала плотности (TDDFT).....	18
1.5	Функционалы для обмена и корреляции	20
1.6	Решение уравнений Кона-Шама	28
1.7	Псевдопотенциалы.....	32
1.8	Плоские волны и сетки.....	37
1.9	Расчет спектра поглощения.....	44
2	Ab initio молекулярная динамика.....	46
2.1	Ehrenfest молекулярная динамика.....	52
2.2	Born-Oppenheimer молекулярная динамика.....	54
2.3	Car-Parrinello молекулярная динамика.....	55
3	Лабораторные работы.....	58
3.1	Лабораторная работа №1. Исследование физических свойств отдельных молекул.....	58
3.2	Лабораторная работа №2. Исследование физических свойств кристаллических веществ.....	60
3.3	Лабораторная работа №3. Исследование оптических свойств молекул и металлических кластеров.....	61
3.4	Лабораторная работа №4. Исследование динамики молекул методом ab initio молекулярной динамики.....	62
	Список использованных источников	65