

Программа дисциплины

Методы расчета электронной структуры материалов

Программу составил:

К. С. Фиданян, PhD

Аннотация

Курс знакомит студентов с методами расчёта электронной структуры материалов, начиная с простейших иллюстративных задач, таких как численное решение одномерного уравнения Шрёдингера, и заканчивая методами, которые имеют практическую значимость, такими как теория функционала плотности (DFT). В результате освоения курса у студентов сформируется понимание общих принципов построения программы для расчётов, появится навык написания компьютерных программ на языке Python для проведения расчётов электронной структуры и визуализации результатов.

Цель дисциплины

По результатам курса обучающиеся должны понимать физические принципы, заложенные в различные модели для описания многоэлектронных систем, быть в состоянии программировать некоторые такие модели и правильно интерпретировать результаты электронно-структурных расчётов.

Задачи дисциплины

Ознакомление обучающихся с различными методами расчета электронной структуры атомов, молекул и твёрдых тел. Выработка понимания преимуществ, недостатков и области применимости каждого метода, выработка навыка планирования архитектуры расчётной программы и написания таких программ.

Содержание дисциплины

1. Приближение Борна-Оппенгеймера
Введение. Моделирование системы из ядер и электронов. Различные системы координат для представления атомистической системы. Приближение Борна-Оппенгеймера. Поверхность потенциальной энергии. Границы применимости ПБО, примеры неадиабатических эффектов.
2. Одномерное уравнение Шрёдингера
Гармонический осциллятор. Система атомных единиц. Точное решение уравнения Шрёдингера. Квантовая механика и численные решения: некоторые наблюдения. Сеточное представление задачи, патологическое асимптотическое поведение решения. Метод Нумерова. Уравнение Шрёдингера для сферически симметричного потенциала. Сферические координаты, особенности перехода из декартовой в сферическую систему координат. Лапласиан в сферических координатах. Потенциал Кулона, сингулярность в начале координат. Методы устранения сингулярности. Границы применимости одномерного представления для расчёта электронной структуры.
3. Вариационный метод
Вариационный принцип. Демонстрация вариационного принципа. Преимущества вариационного метода. Энергия основного состояния. Базисные функции. Базисы гауссовых и слэтеровских орбиталей, базис плоских волн, их преимущества и недостатки. Особенности неортогональных наборов базисных функций. Написание программы для расчёта эл. структуры вариационным методом.

4. Приближение самосогласованного поля. Метод Хартри / Хартри-Фока
Многоэлектронная задача. Экспоненциальный рост сложности с ростом числа электронов. Метод среднего поля. Метод Хартри. Уравнения Хартри. Собственные значения и энергия Хартри. Самосогласованное поле. Численная реализация метода Хартри для радиальной задачи. Некорректность метода Хартри. Фермионные свойства электронов. Детерминант Слэтера. Метод Хартри-Фока. Кулоновский и обменный потенциал. Корреляционная энергия. Атом гелия. Матричные элементы гамильтониана. Численная реализация метода Хартри-Фока для атома гелия в гауссовом базисе.
5. Теория функционала плотности
Теорема Хоэнберга-Кона. Уравнения Кона-Шэма, их отличие от уравнений Хартри. Приближённые обменно-корреляционные функционалы. Приближение локальной плотности (LDA), приближение обобщённых градиентов (GGA), потенциал Пердью-Бёрка-Эрнцехофа (PBE). Гибридные функционалы.
Структура программы для расчётов методом ТФП (DFT). Написание простейшего DFT-кода.
6. Твёрдое тело
Идеальный кристалл: основные свойства и определения. Периодические граничные условия. Решётка Бравэ, базис векторов трансляции. Точечные и пространственные группы симметрии. Обратное пространство, сопряженный базис. Преобразование Фурье. Теорема Блоха, блоховские функции. Решение задачи для свободного электрона в периодических граничных условиях. Решение электронной задачи в потенциале кристалла. Базис плоских волн. Быстрое преобразование Фурье.
7. Псевдопотенциалы
Кулоновский потенциал и базис плоских волн. Глубокие электронные уровни и валентная оболочка. Псевдопотенциалы.
8. Электронные свойства твёрдых тел
Дисперсия электронных уровней. Электронные зоны, свойства металлов, полупроводников и диэлектриков. Примесные уровни, допирование, полупроводники <i>p</i> - и <i>n</i> -типа. Плотность электронных состояний, её роль в контексте сканирующей туннельной микроскопии. Оптические свойства.
9. Гармоническое приближение
Гармоническое приближение поверхности потенциальной энергии. Колебания в молекулах. Колебания решетки в твёрдом теле, фононы. Связь фононов с теплопроводностью и электропроводностью. Выход за пределы гармонического приближения: приближение 3-го порядка. Молекулярная динамика как средство расчёта колебательных свойств.
10. Интеграция электронно-структурных расчётов с другими инструментами
Современные программные пакеты для электронно-структурных расчётов. Пакеты VASP, Quantum Espresso. Современные пакеты для расчёта молекулярной динамики: LAMMPS, i-PI. Интерфейсы сопряжения пакетов для решения атомной и электронной задач. Пакет ASE.