

Тығыздық функционалы теориясы негізінде кристалдардың құрылымдық және электрондық қасиеттерін зерттеу

Найзабеков Б., әл-Фараби атындағы ҚазҰУ

Ғылыми жетекшілері: Құрманғалиева В.О. Абдықадыров Б.А.

Тығыздық функционалдық теориясы (Density Functional Theory) өзара әрекеттесетін бөлшектердің маңызды құрылымдары электрондық функционалдық теориясы бойынша түсіндіруге болады. Бұл скаляр функция негізінен үш айнымалы жалпы күйінен және қозу спектрінен ақпарат береді. Осындай көпэлектрондық функционалдық жүйенің, нөлдік температурада болуы алғаш рет Кон және Хоэнберг жұмыстарында дәлелденген болатын.

Мермин жұмысында Кон және Хоэнберг теоремасының дәлелдемесінің түрі айнымалы температура жүйесінде таралған. Бірақ бұл жұмыстарда мұндай функционал тұрғызуы нақты көрсетілмеген[1]. Жүйенің негізгі күйіне ариалған Хоэнберг-Кон теоремасы:

$$E_0 = E[p] = E_{kin}[p] + E_{ion}[p] + E_{hartree}[p] + E_{xc}[p] \quad (1)$$

мұндағы E_{xc} – нақты белгілі емес

Хоэнберг-Кон теоремасында гамильтониан нақты дәлдікпен(константаға дейін) анықталған, көпбөлшекті толқындық функциялар да анықталған. Осылай жүйенің барлық қасиеттері толығымен зарядтың негізгі тығыздық күйімен анықталады n_0 . Бұл теориядағы негізгі өлшем – зарядтық тығыздық $n(r)$ [2].

Хартри-Фок әдісі кванттық химияда молекулалардың қасиеттерін анықтауда кеңінен қолданылады. H_2 , H_2O , CH_4 , C_2H_6 , C_6H_6 , CO , N_2 , NH_3 бұл молекулаларға өлшенген біртекті арақашықтық пен бұрыштар эксперименттік өлшеулерден бірнеше пайызға өзгеше. Бұл әдіс электрондары аса тығыз жүйелерді сипаттау үшін келмейді(мысалы, өтпелі металдар)

DFT (Density Functional Theory) есептеу физикасындағы қатты дене және материалтанудағы ең көп тараған әдіс болып табылады (тиімді және дәл). Қазіргі уақытта DFT нәтижелерін жақсартуда ешқандай жүйелі әдіс жоқ (Хартри-Фок әдісінен басқа). Оның нәтижелері нақты корреляциялық-ауыспалы потенциалды таңдауға байланысты[3]. Қорытындылап айтатын болсақ:

- Қазіргі таңда күн тақталардың, компьютерлік технологиялардың дамуы кристалдарға, перовскиттерге жағары қарқынмен зерттеулер жүргізілуде.
- Перовскит негізінде жасалатын күн батареялары энергия тиімділігі бойынша 20 пайыз жоғары екен. Оны кремнимен салыстырғанда бірнеше басымдылыққа ие. Мысалы, бағасы арзан және перовскиттен дайындау технология жеңіл болады.

Пайдаланған әдебиет:

- [1] А.М. Сатанин “Введение в теорию функционала плотности”
- [2] P.Hohenberg and W.Kohn, “Inhomogeneous electron gas”
- [3] Пчелкина З. “Различные приближения для расчета электронной структуры твердых тел: область применения и ограничения”

- 46 стр. Қалымова Ж.А., «Айналудың аспан денелерінде атқаратын ролі» (әл-Фараби атындағы ҚазҰУ)
- 47 стр. Карсыбаев Б.Т., «Ядролық зерттеу реакторларының классификациялық белгілерінің материалдар мен конструкцияларды таңдауға әсері» (әл-Фараби атындағы ҚазҰУ)
- 48 стр. Кенжебаева С.С., «Басқарылатын шекаралық шартты көп бөлшекті жүйелермен динамикалық орнықты күйлерді зерттеу» (әл-Фараби атындағы ҚазҰУ).
- 49 стр. Кенжебаев Н.Б., «Расчет прохождения нейтронов через каталитический состав (Pb, Bi, Po) С помощью программного комплекса MCNP» (КазНУ им.аль-Фараби).
- 50 стр. Қантай Г. Г., Кенжина И.Е., Чебакова Е.А., «Исследование доз облучения от солнечных вспышек 23-24 циклов солнечной активности в атмосфере Земли» (КазНУ им.аль-Фараби).
- 51 стр. Қықымова І.Ж., «Ядролық жүйе коллективтік күйлерінің фермиондық теориясын атомдық салмағы орта ядроларға қолдану» (әл-Фараби атындағы ҚазҰУ).
- 52 стр. Майлибай Д.Ж., Кадыров А.Н., Мансурова А.А., «Изучение состава и параметров взрыва Челябинского метеорита» (НИИШ гимназия «Самопознания», Алматы).
- 53 стр. Малыбаев А.Н., «Расчет термодинамических свойств идеального газа методом формализма геометротермодинамики» (КазНУ им.аль-Фараби).
- 54 стр. Мамыкенов Д.Т., «Серпімсіз антипротон-протондық әрекеттесулердегі сферисита мен үлестік серпімсіздік коэффициенті арасындағы тәуелділікті зерттеу» (әл-Фараби атындағы ҚазҰУ).
- 55 стр. Мансурова А.А., «Изучение состава и параметров взрыва Челябинского метеорита» (НИИШ)
- 56 стр. Мустафин Д., «Магнитные моменты нечётных и чётных атомных ядер в одночастичных моделях» (КазНУ им.аль-Фараби).
- 57 стр. Мустафина А.А., Абишев М.Е., Әбдіқали Ж.Н., «Ядерно-физические методы диагностики онкологических заболеваний» (КазНУ им.аль-Фараби).
- 58 стр. Мырзабаев А.А., «Th ядроларындағы жұптылығы оң және теріс деңгейлердің бозондық қасиеттерін зерттеу. Изотоптар спектрлері мен γ - ауысу ықтималдықтары» (әл-Фараби атындағы ҚазҰУ).
- 59 стр. .П., Кичанов С.Е., Лукин Е.В., «Исследование медного пула времен правления Узбек-хана Золотой Орды методом нейтронной радиографии и томографии» (ОИЯИ, Дубна).
- 60 стр. Найзабеков Б., «Тығыздық функционалы теориясы негізінде кристалдардың құрылымдық және электрондық қасиеттерін зерттеу» (әл-Фараби атындағы ҚазҰУ).
- 61 стр. Несіпбай А., Жабаева С., «Айқын гало құрылымды ^{68}Ne ядроларынан пиондардың шашырауын зерттеу» (әл-Фараби атындағы ҚазҰУ).
- 62 стр. Нурдаuletов Д.Д., Земнухов В.С., Жабаева С.О., «Исследование методов борьбы с астероидной опасностью» (НИИШ гимназия «Самопознания», Алматы).
- 63 стр. Нуркасова А.Е., «Изучение размерных спектров сферосом в зависимости от дозы альфа-облучения» (КазНУ им.аль-Фараби).
- 64 стр. Нурлан К., Волков М.К., Пивоваров А., «Распад $\tau \rightarrow K\nu$ в модели Намбу-Иона-Лазинио» (ОИЯИ, Дубна).
- 65 стр. Нұршаева Ф.С., «Онкологиялық аурулар диагностикасындағы қысқа ғұмырлы радионуклидтер» (әл-Фараби атындағы ҚазҰУ).
- 66 стр. Нұршаева Ф.С., Оразбаев Е.К., «ВВР-К реакторының көмегімен ядролық медицина үшін қысқа ғұмырлы радионуклидтерді алу» (әл-Фараби атындағы ҚазҰУ).
- 67 стр. Омар Ж., «Нейтронды жұлдыздар мен ақ ергежейлілердің кристалдық торларындағы фонон- ядролы әсерлесулер» (әл-Фараби атындағы ҚазҰУ).