

**Применение теории функционала плотности для
прогнозирования структуры и физико-химических свойств
нанообъектов**

Зайцев А.Л.

Белорусский национальный технический университет

Теория функционала плотности – наиболее совершенная теория многих частиц в квантовой механике, разработанная для описания электронной структуры молекул и конденсированных сред, в том числе их свойств и физико-химических процессов, протекающих с их участием. В последнее время значительный интерес к использованию теории функционала плотности для прогнозирования свойств атомно-молекулярных систем вызван развитием компьютерных технологий, характеризующихся высокой скоростью вычислений, что позволяет реализовать возможности теорий функционала плотности на модельных объектах, содержащих до $10^2 - 10^3$ атомов.

Основным достоинством теории функционала плотности является рассмотрение физических величин, легко поддающихся визуализации – электронная плотность основного состояния в реальном трехмерном пространстве, плотность обменно-корреляционной дырки и функция линейного отклика системы электронов, обусловленная изменением их плотности в локальной области пространства, подверженного возмущению.

В докладе рассмотрены некоторые особенности применения теории функционала плотности для квантового моделирования структуры и параметров взаимодействия в молекулярно-кристаллических системах, в частности, кластеров алюминия, исследования процессов реконструкции поверхности нанокристаллических пластин металлов, адсорбции простых молекул на поверхности твердого тела.

Обсуждаются проблемы и перспективы использования открытых и коммерческих программных продуктов, базирующихся на теории функционала плотности, для создания нанокомпозитов и прогнозирования их структурных и физико-химических свойств. Приводятся данные, свидетельствующие об эффективности компьютерного моделирования квантовых систем с использованием теории функционала плотности.