



**АНАЛИЗ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ
КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР
СОВРЕМЕННЫМИ МЕТОДАМИ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ**

И.Р. Шеин

Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия
e-mail: shein@ihim.uran.ru

Приводится обзор современных вычислительных методов квантовой теории (DFT, Хартри – Фока и др.), применяемых для анализа физико-химических свойств конденсированных сред (электронные и магнитные структуры, химической связи, механических, спектральных характеристик, фазовой и динамической стабильности, динамических характеристик на основе первопринципных методов молекулярной динамики и др.). Рассматриваются модели учета сильной электронной корреляции (LSDA+U, гибридные функционалы, методы теории динамического среднего поля). Приводится сравнение вычислительных пакетов (VASP, Quantum Espresso, Wien2K, Siesta, ELK и проч.). Обсуждаются их возможности, преимущества и недостатки. Приводится сравнение теоретических расчетов с имеющимися экспериментальными результатами. Показывается, что корректное использование современных вычислительных методов квантовой теории конденсированных сред позволяет получить объяснение большого количества их физико-химических свойств, так же дать точный прогноз этих свойств для новых материалов.