



دانشگاه علوم

پایان نامه برای دریافت مدرک کارشناسی ارشد

رشته فیزیک

گروه فیزیک

مطالعه اصول اولیه اثر فروتن ناهمبند روی خواص
الکترونیکی آکسید گیتما نوری با استفاده از نظریه تابعی چگالی

تهیه کننده: حمیدرضا حسینی

استاد راهنما:

دکتر پرویز شادمان

استاد مشاور:

دکتر محسن رفیعی

شماره ثبت: ۱۳۹۰

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه پیام نور

دانشکده علوم

مرکز مشهد

پایان نامه

برای دریافت مدرک کارشناسی ارشد

رشته فیزیک

گروه فیزیک

مطالعه اصول اولیه اثر افزودن ناخالصیها روی خواص

الکترونیکی اکسید تیتانیوم با استفاده از نظریه

تابعی چگالی

حمید پور حسینی

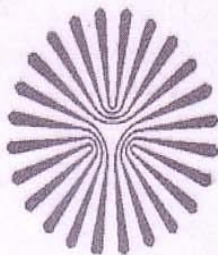
استاد راهنما:

آقای دکتر محمدرضا بنام

استاد مشاور:

آقای دکتر افضل رقوی

شهریور ۱۳۹۰



دانشگاه پیام نور خراسان رضوی

بسم تعالی

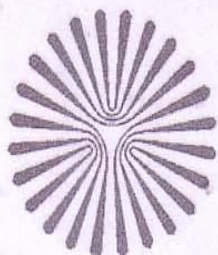
صور تجلسه دفاع از پایان نامه دوره کارشناسی ارشد

جلسه دفاع از پایان نامه دوره کارشناسی ارشد خانم / آقای حمید پورحسینی دانشجوی رشته فیزیک گرایش حالت جامد به شماره دانشجویی ۸۷۰۰۰۴۲۷۵ تحت عنوان « مطالعه اصول اولیه اثر افزودن ناخالصیها روی خواص الکترونیکی اکسید تیتانیوم با استفاده از نظریه تابعی چگالی » با حضور هیات داوران در روز چهارشنبه مورخ ۹۰/۶/۳۰ ساعت ۲۰-۱۸ در محل ساختمان شماره ۱ برگزار شد و هیات داوران پس از بررسی، پایان نامه مذکور را شایسته نمره به عدد ۱۹/۵ به حروف نوزده و پنج به درج کمال تشخیص داد.

| ردیف | نام و نام خانوادگی | هیات داوران | مرتبه دانشگاهی | دانشگاه / موسسه | امضاء |
|------|--------------------|------------------------|----------------|-------------------|-------|
| ۱ | دکتر محمد رضا بنام | استاد راهنما | دانشیار | پیام نور مشهد | |
| ۲ | دکتر افضل رقوی | استاد مشاور | استادیار | پیام نور مشهد | |
| ۳ | دکتر جواد باعدی | استاد داور | استادیار | تربیت معلم سبزوار | |
| ۴ | دکتر جمیل آریایی | نماینده تحصیلات تکمیلی | استادیار | پیام نور مشهد | |

تاریخ: ۱۳۹۰/۷/۵

شماره: ۱۳۹۰۱۳۰۷۱



دانشگاه پیام نور خراسان رضوی

بسم تعالی

جمهوری اسلامی ایران

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری

تصویب نامه دفاع پایان نامه

پایان نامه تحت عنوان « مطالعه اصول اولیه اثر افزودن ناخالصیها روی خواص الکترونیکی اکسید تیتانیوم با استفاده از نظریه تابعی

چگالی » که توسط حمید پورحسینی تهیه و به هیات داوران ارائه گردیده است مورد تأیید می باشد.

تاریخ دفاع: ۹۰/۶/۳۰ نمره: ۱۹,۵ درجه ارزشیابی: ۱۳,۵

فرزده رهنم

اعضای هیات داوران:

| ردیف | نام و نام خانوادگی | هیات داوران | مرتبه دانشگاهی | دانشگاه / موسسه | امضاء |
|------|--------------------|------------------------|----------------|-------------------|-------|
| ۱ | دکتر محمد رضا بنام | استاد راهنما | دانشیار | پیام نور مشهد | |
| ۲ | دکتر افضل رقوی | استاد مشاور | استاد یار | پیام نور مشهد | |
| ۳ | دکتر جواد باعدی | استاد داور | استاد یار | تربیت معلم سبزوار | |
| ۴ | دکتر جمیل آریایی | نماینده تحصیلات تکمیلی | استاد یار | پیام نور مشهد | |

اینجانب حمید پورحسینی دانشجوی ورودی سال ۱۳۸۷ مقطع کارشناسی ارشد رشته فیزیک گواهی می‌نمایم چنانچه در پایان نامه خود از فکر، ایده و نوشته دیگری بهره گرفته‌ام با نقل قول مستقیم یا غیر مستقیم منبع و ماخذ آن را نیز در جای مناسب ذکر کرده‌ام. بدیهی است مسئولیت تمامی مطالبی که نقل قول دیگران نباشد بر عهده خویش می‌دانم و جوابگویی آن خواهم بود. دانشجو تأیید می‌نماید که مطالب مندرج در این پایان نامه (رساله) نتیجه تحقیقات خودش می‌باشد و در صورت استفاده از نتایج دیگران مرجع آن را ذکر نموده است.

حمید پورحسینی

شهریور ۹۰

اینجانب حمید پورحسینی دانشجوی ورودی سال ۱۳۸۷ مقطع کارشناسی ارشد رشته فیزیک گواهی می‌نمایم چنانچه براساس مطالب پایان نامه خود اقدام به انتشار مقاله، کتاب، و ... نمایم ضمن مطلع نمودن استاد راهنما، با نظر ایشان نسبت به نشر مقاله، کتاب، و ... و به صورت مشترک و با ذکر نام استاد راهنما مبادرت نمایم.

حمید پورحسینی

شهریور ۹۰

کلیه حقوق مادی مترتب از نتایج مطالعات، آزمایشات و نوآوری ناشی از تحقیق موضوع این پایان نامه متعلق به دانشگاه پیام نور می‌باشد.

شهریور ۹۰

تقدیم به همه عزیزانی که

من را در راه رسیدن به این مهم

یاری نمودند.

چکیده

هدف از اجرای این پروژه ، بررسی نظری خواص الکترونیکی اکسید تیتانیوم (TiO_2) در فاز روتایل (Rutile) در حالت خالص و همراه با ناخالصی های گوگرد، سلنیوم، تلوریم و پلونیوم از گروه اکسیژن و زیرکونیم و هافنیم از گروه تیتانیوم و تأثیر اثر ناخالصی روی خواص فوتوکاتالیستی این ماده می باشد.

محاسبات بر پایه ی نظریه ی تابعی چگالی (DFT) و استفاده از روش شبه پتانسیل با استفاده از نرم افزار Siesta انجام شده است.

نتایج بدست آمده از ساختار نواری و چگالی حالتها نشان می دهد که TiO_2 در فاز روتایل یک نیمه رسانا با گاف نواری مستقیم به اندازه ی $2/4 \text{ eV}$ در نقطه ی Γ است. همچنین این محاسبات نشان می دهد که بیشینه ی نوار ظرفیت با اربیتالهای $2p\text{-O}$ و کمینه ی نوار رسانش با اربیتالهای $3d\text{-Ti}$ شکل گرفته است.

محاسبات مشابهی در حضور ناخالصی ذکرشده در TiO_2 انجام شده است . نتیج نشانگر این است که افزودن ناخالصی از گروه اکسیژن سبب کاهش گاف نواری می گردد ، اما ناخالصی از گروه تیتانیوم تاثیری روی کاهش گاف نواری ندارد.

فهرست مطالب

صفحه

عنوان

فصل اول : مروری بر نظریه چگالی

| | |
|---------|-----------------------------------|
| ۱..... | مقدمه |
| ۴..... | ۱-۱ نظریه تک الکترونی |
| ۵..... | ۱-۱-۱ تقریب بورن-این هایمر |
| ۷..... | ۲-۱-۱ تقریب هارتری-فوک-اسلیتر |
| ۱۰..... | ۲-۱ نظریه تابعی چگالی (DFT) |
| ۱۶..... | ۱-۲-۱ تقریب چگالی موضعی (LDA) |
| ۱۸..... | ۲-۲-۱ موفقیت و شکستها |
| ۲۱..... | ۳-۲-۱ تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) |
| ۲۲..... | ۳-۱ روشهای حل معادلات کوهن-شم |

فصل دوم : خواص و کاربردهای تیتانیوم دی اکسید

| | |
|---------|--------------------------------|
| ۲۴..... | مقدمه |
| ۲۵..... | ۱-۲ آشنایی با عنصر تیتانیوم Ti |
| ۲۵..... | ۱-۱-۲ ساختارهای Ti |

| | |
|---------|--|
| ۲۶..... | ۲-۱-۲ ویژگیهای Ti |
| ۲۶..... | ۳-۱-۲ کاربردهای Ti |
| ۲۷..... | ۲-۲ آشنایی با تیتانیوم دی اکسید TiO ₂ |
| ۲۷..... | ۱-۲-۲ ویژگیهای TiO ₂ |
| ۲۸..... | ۲-۲-۲ کاربردهای TiO ₂ |
| ۲۸..... | ۱-۲-۲-۲ زیست محیطی و بهداشتی |
| ۲۸..... | ۲-۲-۲-۲ کاربردهای صنعتی |
| ۲۹..... | ۳-۲-۲-۲ کاربردهای بهداشتی - آرایشی |
| ۳۰..... | ۴-۲-۲-۲ کاربردهای الکترونیکی |

فصل سوم : ساختارها و برخی خواص دی اکسید تیتانیوم

| | |
|---------|--|
| ۳۱..... | مقدمه |
| ۳۲..... | ۱-۳ ساختارها و فازهای بلوری TiO ₂ |
| ۳۲..... | ۱-۱-۳ فاز روتایل |
| ۳۳..... | ۲-۱-۳ فاز آناتاس |
| ۳۴..... | ۳-۱-۳ فاز بروکایت |
| ۳۵..... | ۲-۳ خواص فیزیکی اکسید تیتانیوم |
| ۳۶..... | ۱-۲-۳ خواص الکتریکی |

| | |
|----|---|
| ۳۶ | خواص مکانیکی ۲-۲-۳ |
| ۳۷ | خواص اپتیکی ۳-۲-۳ |
| ۳۷ | خاصیت مغناطیسی ۴-۲-۳ |
| ۳۹ | برخی از آثار فیزیکی و شیمیایی کاربردی ۳-۳ |
| ۳۹ | اثر ابر آبدوستی ۱-۳-۳ |
| ۳۹ | اثر هوندا- فوجی شیما ۲-۳-۳ |
| ۴۰ | اثر فوتوکاتالیست ۳-۳-۳ |

فصل چهارم : نتیجه محاسبات با استفاده از نرم افزار SIESTA با استفاده از

شبه پتانسیل

| | |
|----|--|
| ۴۲ | مقدمه |
| ۴۳ | ۱-۴ محاسبات TiO_2 در حالت خالص |
| ۴۳ | ۱-۱-۴ روش محاسبات |
| ۴۵ | ۲-۱-۴ بررسی خواص الکترونیکی TiO_2 |
| ۴۶ | ۳-۱-۴ چگالی حالت های کلی و جزئی |
| ۵۰ | ۲-۴ محاسبات TiO_2 در حضور ناخالصی |
| ۵۰ | مقدمه |
| ۵۰ | ۱-۲-۴ اثر ناخالصی گوگرد (S) در TiO_2 |

- ۵۰..... ۱-۱-۲-۴ روش محاسبات
- ۵۱..... ۲-۱-۲-۴ بررسی خواص الکترونیکی
- ۵۲..... ۳-۱-۲-۴ چگالی حالت‌های کلی و جزئی
- ۵۶..... ۲-۲-۴ اثر ناخالصی سلینیوم (Se) در TiO_2
- ۵۶..... ۱-۲-۲-۴ روش محاسبات
- ۵۷..... ۲-۲-۲-۴ بررسی خواص الکترونیکی
- ۵۸..... ۳-۲-۲-۴ چگالی حالت‌های کلی و جزئی
- ۶۰..... ۳-۲-۴ اثر ناخالصی تلوریم (Te) در TiO_2
- ۶۰..... ۱-۳-۲-۴ روش محاسبات
- ۶۱..... ۲-۳-۲-۴ بررسی خواص الکترونیکی
- ۶۲..... ۳-۳-۲-۴ چگالی حالت‌های کلی و جزئی
- ۶۵..... ۴-۲-۴ اثر ناخالصی پلونیوم (Po) در TiO_2
- ۶۵..... ۱-۴-۲-۴ روش محاسبات
- ۶۶..... ۲-۴-۲-۴ بررسی خواص الکترونیکی
- ۶۷..... ۳-۴-۲-۴ چگالی حالت‌های کلی و جزئی
- ۷۰..... ۵-۲-۴ اثر ناخالصی زیرکونیم (Zr) در TiO_2
- ۷۰..... ۱-۵-۲-۴ روش محاسبات
- ۷۱..... ۲-۵-۲-۴ بررسی خواص الکترونیکی
- ۷۲..... ۳-۵-۲-۴ چگالی حالت‌های کلی و جزئی
- ۷۵..... ۶-۲-۴ اثر ناخالصی هافنیم (Hf) در TiO_2

۷۵..... ۱-۶-۲-۴ روش محاسبات

۷۶..... ۲-۶-۲-۴ بررسی خواص الکترونیکی

۷۷..... ۳-۶-۲-۴ چگالی حالت‌های کلی و جزئی

۸۰..... ۳-۴ نتیجه گیری

۸۲..... مراجع

۸۸..... SIESTA نرم افزار

فهرست شکلها و جدول ها

| صفحه | عنوان |
|------|--|
| ۲۵ | شکل ۱-۲ ساختارهای بلوری Ti..... |
| ۲۸ | شکل ۲-۲ نمایی از کاربردهای TiO ₂ |
| ۲۹ | شکل ۳-۲ نمایش خود تمیزکنندگی لایه نازک اکسید تیتانیوم..... |
| ۲۹ | شکل ۴-۲ استفاده از TiO ₂ در ساخت رنگدانه..... |
| ۳۲ | شکل ۱-۳ نمایش ساختار کریستالی روتایل..... |
| ۳۳ | شکل ۲-۳ نمایش ساختار کریستالی آناتاس..... |
| ۳۴ | شکل ۳-۳ نمایش ساختار بلوری بروکایت..... |
| ۳۵ | جدول ۱-۳ خواص فیزیکی اکسید تیتانیوم..... |
| ۳۶ | جدول ۲-۳ خواص فیزیکی و مکانیکی اکسید تیتانیوم..... |
| ۳۷ | جدول ۳-۳ خاصیت اپتیکی تیتانیوم..... |
| ۴۰ | شکل ۴-۳ فرایند اکسید تیتانیوم در مقابل نور فرابنفش..... |
| ۴۱ | شکل ۵-۳ نمایی از فعالیت فوتوکاتالیستی بر اساس معادلات ذکر شده..... |
| ۴۳ | شکل ۱-۴ بهینه سازی ثابت شبکه..... |
| ۴۴ | شکل ۲-۴ بهینه سازی Kgrid Cutoff..... |
| ۴۴ | شکل ۳-۴ بهینه سازی Mesh Cutoff..... |

- شکل ۴-۴ ساختار نوار انرژی با تقریب GGA ۴۵
- شکل ۴-۵ چگالی حالتهای کلی TiO_2 ۴۶
- شکل ۴-۶ چگالی حالت اوربیتال 2p-O در TiO_2 ۴۷
- شکل ۴-۷ چگالی حالت اوربیتال 3d-Ti در TiO_2 ۴۷
- شکل ۴-۸ مقایسه PDOS ها با DOS ۴۸
- شکل ۴-۹ منطقه اول بریلوین ۴۸
- شکل ۴-۱۰ چگالی حالتهای کلی برای TiO_2 خالص ۴۹
- شکل ۴-۱۱ بهینه سازی ثابت شبکه ۵۱
- شکل ۴-۱۲ بهینه سازی Kgrid Cutoff ۵۱
- شکل ۴-۱۳ بهینه سازی Mesh Cutoff ۵۱
- شکل ۴-۱۴ ساختار نواری $\text{TiO}_2(1 \times 1 \times 1)$ خالص (چپ)، ساختار نواری $\text{TiO}_2(1 \times 1 \times 1)$ در حضور ناخالصی گوگرد(راست) ۵۲
- شکل ۴-۱۵ چگالی حالت کلی و جزئی $\text{S Doped TiO}_2(1 \times 1 \times 1)$ ۵۳
- شکل ۴-۱۶ چگالی حالت کلی و جزئی $\text{S Doped TiO}_2(1 \times 1 \times 2)$ ۵۳
- شکل ۴-۱۷ چگالی حالت کلی و جزئی $\text{S Doped TiO}_2(2 \times 2 \times 2)$ ۵۴
- شکل ۴-۱۸ مقایسه چگالی حالت کلی برای سه وضعیت ۵۴
- شکل ۴-۱۹ بهینه سازی ثابت شبکه ۵۶
- شکل ۴-۲۰ بهینه سازی Kgrid Cutoff ۵۶

- شکل ۴-۲۱ بهینه سازی Mesh Cutoff ۵۶
- شکل ۴-۲۲ ساختار نواری $TiO_2(1 \times 1 \times 1)$ خالص (چپ)، ساختار نواری $TiO_2(1 \times 1 \times 1)$ در حضور ناخالصی سلنیوم (راست) ۵۷
- شکل ۴-۲۳ چگالی حالت کلی و جزئی Se Doped $TiO_2(1 \times 1 \times 1)$ ۵۸
- شکل ۴-۲۴ چگالی حالت کلی و جزئی Se Doped $TiO_2(1 \times 1 \times 2)$ ۵۸
- شکل ۴-۲۵ چگالی حالت کلی و جزئی Se Doped $TiO_2(2 \times 2 \times 2)$ ۵۹
- شکل ۴-۲۶ مقایسه چگالی حالت کلی برای سه وضعیت ۵۹
- شکل ۴-۲۷ بهینه سازی ثابت شبکه ۶۰
- شکل ۴-۲۸ بهینه سازی Kgrid Cutoff ۶۰
- شکل ۴-۲۹ بهینه سازی Mesh Cutoff ۶۱
- شکل ۴-۳۰ ساختار نواری $TiO_2(1 \times 1 \times 1)$ خالص (چپ)، ساختار نواری $TiO_2(1 \times 1 \times 1)$ در حضور ناخالصی تلوریم (راست) ۶۲
- شکل ۴-۳۱ چگالی حالت کلی و جزئی Te Doped $TiO_2(1 \times 1 \times 1)$ ۶۳
- شکل ۴-۳۲ چگالی حالت کلی و جزئی Te Doped $TiO_2(1 \times 1 \times 2)$ ۶۳
- شکل ۴-۳۳ چگالی حالت کلی و جزئی Te Doped $TiO_2(2 \times 2 \times 2)$ ۶۴
- شکل ۴-۳۴ مقایسه چگالی حالت کلی برای سه وضعیت ۶۴
- شکل ۴-۳۵ بهینه سازی ثابت شبکه ۶۵
- شکل ۴-۳۶ بهینه سازی Kgrid Cutoff ۶۵

- ۶۶..... Mesh Cutoff بهینه سازی ۳۷-۴ ذشکل
- شکل ۳۸-۴ ساختار نواری $TiO_2(1 \times 1 \times 1)$ خالص (چپ)، ساختار نواری $TiO_2(1 \times 1 \times 1)$ در حضور ناخالصی پلونیوم (راست)..... ۶۷
- شکل ۳۹-۴ چگالی حالت کلی و جزئی Po Doped $TiO_2(1 \times 1 \times 1)$ ۶۸
- شکل ۴۰-۴ چگالی حالت کلی و جزئی Po Doprd $TiO_2(1 \times 1 \times 2)$ ۶۸
- شکل ۴۱-۴ چگالی حالت و جزئی Po Doped $TiO_2(2 \times 2 \times 2)$ ۶۹
- شکل ۴۲-۴ مقایسه چگالی حالت کلی برای سه وضعیت..... ۶۹
- شکل ۴۳-۴ بهینه سازی ثابت شبکه..... ۷۰
- شکل ۴۴-۴ بهینه سازی $Kgrid$ Cutoff..... ۷۰
- شکل ۴۵-۴ بهینه سازی $Mesh$ Cutoff..... ۷۱
- شکل ۴۶-۴ ساختار نواری $TiO_2(1 \times 1 \times 1)$ خالص (چپ)، ساختار نواری $TiO_2(1 \times 1 \times 1)$ در حضور ناخالصی زیرکونیوم (راست)..... ۷۲
- شکل ۴۷-۴ چگالی حالت کلی و جزئی Zr Doped $TiO_2(1 \times 1 \times 1)$ ۷۳
- شکل ۴۸-۴ چگالی حالت کلی و جزئی Zr Doprd $TiO_2(1 \times 1 \times 2)$ ۷۳
- شکل ۴۹-۴ چگالی حالت و جزئی Zr Doped $TiO_2(2 \times 2 \times 2)$ ۷۴
- شکل ۵۰-۴ مقایسه چگالی حالت کلی برای سه وضعیت..... ۷۴
- شکل ۵۱-۴ بهینه سازی ثابت شبکه..... ۷۵
- شکل ۵۲-۴ بهینه سازی $Kgrid$ Cutoff..... ۷۵

- شکل ۴-۵۳ بهینه سازی Mesh Cutoff ۷۶
- شکل ۴-۵۴ ساختار نواری $TiO_2(1 \times 1 \times 1)$ خالص (چپ)، ساختار نواری $TiO_2(1 \times 1 \times 1)$ در حضور ناخالصی هافنیوم (راست) ۷۷
- شکل ۴-۵۵ چگالی حالت کلی و جزئی Hf Doped $TiO_2(1 \times 1 \times 1)$ ۷۸
- شکل ۴-۵۶ چگالی حالت کلی و جزئی Hf Doped $TiO_2(1 \times 1 \times 2)$ ۷۸
- شکل ۴-۵۷ چگالی حالت کلی و جزئی Hf Doped $TiO_2(2 \times 2 \times 2)$ ۷۹
- شکل ۴-۵۸ مقایسه چگالی حالت کلی برای سه وضعیت ۷۹

فصل اول

مروری بر نظریه تابعی چگالی

مقدمه

توصیف سیستم های بس ذره ای یکی از اهداف عمده فیزیک در قرن حاضر است . یک سیستم بس ذره ای از تعداد زیادی ذرات (مشابه یا غیر مشابه) تشکیل یافته است که با یکدیگر برهمکنش دارند . مثال های عینی آن اتمها، مولکول ها و بلورها هستند که هر یک از تعدادی الکترون و هسته تشکیل شده اند. در اینجا، توجه خود را به بلور متمرکز می کنیم. لیکن روشهایی که ارائه می شوند کلی بوده و علی الاصول برای انواع دیگر سیستم های بس ذره ای نیز جای دارند. اگر بخواهیم یک سیستم بس ذره ای را بر روی سی و انرژی و دیگر خواص آن را محاسبه نماییم، به دو روش این کار انجام می گیرد که یکی روش کلاسیکی و دیگری کوانتومی (ابتدا به ساکن^۱ می باشد).

در روش کلاسیکی ، یک پتانسیل فرضی بین اتمها در نظر گرفته می شود . نیروی وارد بر هر اتم و انرژی بلور با بکارگیری این پتانسیل محاسبه می شود.

در روش کوانتومی ، برای مجموع الکترون ها و هسته های موجود در درون بلور یک معادله شرودینگر نوشته می شود و سپس سعی می شود با اعمال تقریب هایی این معادله شرودینگر بس ذره ای حل و کلیه خواص بلور از جمله انرژی و ساختار آن استخراج شود [۱]. بنابراین در روش کلاسیک مستقلا از چیزی به نام الکترون نام برده نمی شود بلکه اثر وجود الکترون در پتانسیلی که بین اتمها در نظر گرفته می شود به طور غیر مستقیم لحاظ می گردد . حال آنکه در روش کوانتومی از همان ابتدا بلور را متشکل از دو نوع ذرات، هسته ها و الکترون ه ا، می دانیم و معادله شرودینگر برای کل این مجموعه ذرات نوشته می شود . هر یک از این دو روش مزایا و معایبی دارند.

عیب عمده روش کلاسیک در آن است که پتانسیل واحدی برای تمام مواد وجود ندارد و ما ناچاریم برای هر ماده (یا لاقلا هر دسته از مواد) پتانسیل خاص آن را بسازیم . این به این معنی است که پتانسیل انتقال پذیر^۱ نیست و به محیط اطراف وابسته است . برای اینکه پتانسیل دقیق باشد و در محیطهای مختلف و برای مواد گوناگون قابل بکارگیری باشد ، به پارامترهای زیادی در عبارت پتانسیل نیاز داریم که این خود باعث افزایش حجم م حسابات می شود و اگر تعداد پارامترها را کم کنیم، خطای پتانسیل افزایش می یابد . مزیت عمده روش کلاسیک، سرعت بالای محاسبات است که در نتیجه ، انجام محاسبه برای سیستم های بزرگ (متشکل از هزاران ذره) با کامپیوتری با سرعت و حافظه معمولی امکان پذیر است که گاهی این مزیت می تواند مهم باشد . برای مثال، اگر بخواهیم خواصی از ماده را بررسی کنیم که از رفتار ماکروسکوپی آن (نظیر دما)

^۱ Transferable