

# Программа спецкурса "Электронная структура и свойства наночастиц"

в.н.с., д.ф.-м.н. А.Л. Чугреев

Мой папаша пил как бочка,  
И погиб он от вина.  
Я одна осталась дочка,  
И зовусь мамзель Нана!

*Старинный русский водевиль*

Спецкурс предназначен для дипломников кафедр физической химии и электрохимии. **Согласно решению методических комиссий соответствующих кафедр он может быть зачтён как спецкурс по выбору.** В рамках спецкурса рассматриваются основные математические инструменты и физические модели необходимые для понимания процессов, происходящих в наночастицах и других наносистемах (нанотрубках, нанопроводах). Спецкурс носит интегрирующий характер и позволяет активизировать знания, ранее полученные студентами при изучении курсов квантовой механики, теории твёрдого тела, квантовой химии, строения молекул и др., на примере применения их к изучению объектов промежуточных между основными объектами указанных дисциплин (молекулами с одной стороны и твёрдыми телами с другой).

## Примерные темы лекций

1. Понятие о молекулярной системе, аспекты описания: состав, геометрия, электронная структура. Макроскопическое и микроскопическое описание. Особенности моделирования. Волновая функция. Детерминант Слэтера, *Aufbauprinzip*.
2. Что такое "свойство"? Отклики. Физические величины и их операторы. Спектральные свойства. Связь "структура - свойства". Моделирование структуры и свойств. Модельные расчеты "при 0 К", "в одной точке". Моделирование спектральных свойств. Моделирование макроскопических свойств систем (термодинамики и кинетики).
3. Моделирование электронной структуры. *Ab initio* модели. Корреляции электронов Масштабирование потребности *ab initio* моделей в расчетных

ресурсах. Полуэмпирические модели – от атомов к материалам. Модели твердого тела – кристаллы. Приближение почти свободных электронов. Бесструктурные модели: "ящики с желе". Модели с атомарной структурой: Метод (присоединённых) плоских волн. Приближение сильной связи. Метод Хюккеля.

4. Особое положение наносистем - на полпути к пределу (термодинамический и классический пределы).
5. Твердотельные модели наночастиц - наночастицы "без краёв". Одномерные модели и "одномерные" системы. Одноэлектронные состояния – "кристаллические орбитали". Одномерные "щелочные металлы". Теорема альтернантности. Теорема Пайерлса. Корреляция или деформация? Размерные эффекты в моделях "без краёв" (периодические граничные условия). Нанотрубки - "металлы" и "полупроводники".
6. Наночастицы "с краями". Конечно-разностные уравнения для одноэлектронных состояний. Одномерные "наночастицы щелочных металлов". Энергетический спектр.
7. Наночастицы "с краями". Распределение электронной плотности. Свойства первого порядка. Геометрия. Соотношения "длина связи - порядок связи". Волны растяжений и сжатий.
8. Наночастицы "с краями". Свойства первого порядка. Распределение примесей по глубине наночастицы.
9. Свойства второго порядка. Атом-атомная поляризуемость. Поляризационный пропагатор. Закон альтернирующей полярности. Наночастицы "без краёв": взаимное распределение примесей – эффективное взаимодействие.
10. Двух- и трёхмерные наночастицы "с краями". Одноэлектронные состояния. "Поверхность Ферми".
11. Электрон-электронные взаимодействия. Гамильтониан Хаббарда. Расширенный гамильтониан Хаббарда. Поляризационный пропагатор и неустойчивость металлического состояния. "Нанопровод". Электронная структура нанотрубок. STM графита и углеродных нанотрубок.

## Список литературы

- [1] Р. Фейнман. Лекции по физике. вып. 1,2,7,8,9.
- [2] Л.И. Головина. Линейная алгебра и ее приложения.

- [3] Р. Хоффманн. Строение твердых тел и поверхностей. М., Мир, 1990
- [4] R. van Santen. Theoretical Heterogeneous Catalysis. World Scientific, 1991
- [5] И. Майер. Избранные главы квантовой химии. М., Бинум, 2006.