

Первое занятие спецсеминара

Квантовая химия конденсированных и нано систем

в.н.с., д.ф.-м.н. А.Л. Чугреев
Кафедра электрохимии

состоится в понедельник 29 сентября 2008 в 16¹⁵ в комнате Ц02а (Кафедра электрохимии).

Спецсеминар предназначен для дипломников кафедр физической химии и электрохимии. **Согласно решению методических комиссий соответствующих кафедр он может быть зачтён как спецкурс по выбору.** В рамках спецсеминара рассматриваются основные математические инструменты и физические модели необходимые для понимания процессов, происходящих в конденсированных и нано системах (нанотрубках, нанопроводах). Спецсеминар 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). Основная форма занятий – презентации участников по материалам предложенных им для изучения оригинальных работ и их обсуждение. Самостоятельный поиск работ для обсуждения участниками приветствуется. Предполагаемые (возможные) темы для обсуждения :

1. Понятие о молекулярной системе, аспекты описания: состав, геометрия, электронная структура. Макроскопическое и микроскопическое описание. Особенности моделирования.
2. Что такое "свойство"? Отклики. Спектральные свойства. Моделирование структуры и свойств. Моделирование спек-

тральных свойств. Моделирование макроскопических свойств систем (термодинамики и кинетики).

3. Моделирование электронной структуры. *Ab initio* модели. Полуэмпирические модели – от атомов к материалам. Модели твердого тела – кристаллы. Модели с атомарной структурой: Метод (присоединённых) плоских волн. Приближение сильной связи.
4. Твёрдотельные модели наночастиц - наночастицы "без краёв". Одномерные модели и "одномерные" системы. Размерные эффекты в моделях "без краёв" (периодические граничные условия). Нанотрубки - "металлы" и "полупроводники".
5. Наночастицы "с краями". Одномерные "наночастицы щелочных металлов". Энергетический спектр.
6. Наночастицы "с краями". Распределение электронной плотности. Свойства первого порядка. Геометрия. Волны растяжений и сжатий.
7. Наночастицы "с краями". Свойства первого порядка. Распределение примесей по глубине наночастицы.
8. Свойства второго порядка. Атом-атомная поляризуемость. Поляризационный пропагатор. Наночастицы "без краёв": взаимное распределение примесей – эффективное взаимодействие.
9. Двух- и трёхмерные наночастицы "с краями". Одноэлектронные состояния.

10. Электрон-электронные взаимодействия в наночастицах. "Нанопровода". Электронная структура нанотрубок. STM графита и углеродных нанотрубок.

Возможно проведение практических занятий по моделированию с использованием оригинального программного обеспечения (ЕСF2.5, ВFxx).

С другими возможными темами для обсуждения можно ознакомиться на сайте <http://www.qcc.ru/~tch>

Вопросы можно задать по телефону 939-1321 или по e-mail'у tch@elch.chem.msu.ru