

РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ САМООРГАНИЗОВАННЫХ НАНОКЛАСТЕРОВ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ В ПРАКТИКУМЕ ПО НАНОТЕХНОЛОГИЯМ.

Тучин А. В., Макарова М.А., Битюцкая Л.А.

Воронежский государственный университет, Россия, 394006, Воронеж,
Университетская пл. 1, (4732) 20-84-81, me144@phys.vsu.ru

Одним из примеров самоорганизованных нанокластеров являются фуллерены [1]. Исследование фуллеренов экспериментально предполагает наличие сложного, дорогостоящего оборудования. Поэтому широко применяется компьютерное моделирование в специальных программных комплексах, одним из которых является программный комплекс для расчета квантово - механических задач Gaussian03. Gaussian03 позволяет рассчитывать различные свойства молекулярных систем и конденсированных сред, находящихся не только в основном, но и в возбужденных состояниях[2,3].

Целью практических занятий является знакомство с программным комплексом Gaussian 03, приобретение навыков работы в редакторе GaussView, ознакомление с основными неэмпирическими методами расчетов квантово - механических задач и основными базисами для этих расчетов.

В разработанном лабораторном практикуме даются основные теоретические сведения по фуллеренам, их свойствам и областям применения. Подробно рассматриваются возможности программного комплекса Gaussian03 для расчета энергетических и вибрационных спектров этих молекул. Большое внимание уделяется выбору и теоретическому обоснованию расчетов из первых принципов и основных квантово-механических базисов. Контрольные примеры, в которых рассчитываются простые химические соединения, позволяют учащимся получить наглядное представление об энергетическом спектре молекул, построении ИК-спектров и выделении характеристических частот колебания атомов и соотнесении полученных расчетов с экспериментальными данными. В заданиях для самостоятельной работы предлагается рассчитать спектры более сложных молекул – фуллеренов.

Литература

1. *Елецкий А.В.* Фуллерены // УФН Т. 163, №2, 1993г. Стр. 33-60
2. *Макарова Т.Л.* Электрические и оптические свойства мономерных и полимеризованных фуллеренов // ФТП Т. 35, №3, 2001г. Стр. 257-293.
3. *Кон В.* Электронная структура вещества - волновые функции и функционалы плотности // УФН Т.173, №3, 2002г. Стр. 336-348