

## Квантово-химические исследования углеродных наноструктур

Докладчик: аспирант 3 г/о Пыхова А.Д.

Руководитель: д.ф.-м.н. Иоффе И.Н.

Рецензент: к.х.н. Чаркин Д.О.

В настоящее время в мире активно проводятся исследования электронной и атомной структур новых форм углерода, таких как фуллерены, нанотрубы, углеродные торы и их производные - эндо- и экзоэдральные комплексы с металлами, гелием, водородом и пр. Большую роль в этих исследованиях играют теоретические методы квантовой химии и молекулярной динамики, которые позволяют не только интерпретировать результаты различных спектроскопических экспериментов, но и описывать и предсказывать с высокой точностью структуру и свойства новых материалов на основе углерода.

В первой части доклада будут рассмотрены основные приближения квантовой химии, что может быть актуально для студентов/аспирантов факультета наук о материалах, не имеющего в учебной программе курсов квантовой химии и теории строения молекул. Будут описаны основные методы вычислительной квантовой химии и показаны пределы их применимости.

Во второй части доклада будут рассмотрены возможности квантово-химического моделирования на примере больших углеродных структур (фуллеренов, нанотрубок, биологических молекул), будет показано, какие свойства веществ можно получить и насколько они достоверны.

В третьей части доклада будут упомянуты распространённые программные пакеты вычислительной квантовой химии, а также продемонстрированы примеры входных файлов и результаты расчётов для данных программ.