

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	5
Глава 1. Основные подходы	10
1.1. Метод классических потенциалов	10
1.2. Квантово-механический подход	13
1.3. Метод Хартри–Фока	14
1.4. Полуэмпирический подход	15
1.5. Теория функционала электронной плотности	18
1.6. Метод псевдопотенциала	21
Глава 2. Кристаллические структуры и зоны Бриллюэна	23
2.1. Типы решеток	23
2.2. Функции Блоха	25
2.3. Зоны Бриллюэна	27
2.4. Специальные точки	28
Глава 3. Рекомендуемые программы	30
3.1. Пакет FHI96md	30
3.2. Пакет FHI98pp	38
Глава 4. Моделирование объема и поверхности	53
4.1. Тестирование псевдопотенциалов по объемным свойствам	53
4.2. Моделирование поверхности	56
4.3. Димеры на поверхности кремния	57
4.4. Поверхностная энергия	58
Глава 5. Нанообъекты на поверхности	61
5.1. Нанослой металлов на поверхности диэлектрика	61
5.2. Моделирование нанокластеров на поверхности кремния	70
5.3. Сегрегация атомов примесей на поверхности Si(111)	73
Глава 6. Моделирование атомной структуры и формы наночастиц	78
6.1. Наночастицы углерода и кремния	78
6.2. Наночастицы кремния	82
6.3. Диоксид кремния	84
6.4. Карбид вольфрама	87
6.5. Диоксид циркония	89

Глава 7. Механические свойства наночастиц	96
7.1. Упругость наночастиц	96
7.2. Прочность на разрыв: на примере частиц WC.	103
7.3. Модуль сдвига: прослойки кобальта между кристаллитами WC. . .	104
Глава 8. Электронная структура наноразмерных систем.	110
8.1. Общие понятия	110
8.2. Наночастицы кремния	114
8.3. Влияние одиночных атомов примесей	118
8.4. Нанометровый $p-n$ -переход.	120
8.5. Контакт металл-полупроводник	121
8.6. Наносистемы Si-SiO ₂ и Si-SiO ₂ -металл	127
8.7. Электронная структура системы Si-SiO ₂	131
8.8. Электронная структура системы металл-SiO ₂ -Si.	135
Глава 9. Миграция атомов и химические реакции.	138
9.1. Миграция атомов благородных металлов в графите	139
9.2. Атомы бора на поверхности Si(111).	142
9.3. Окисление нанокластеров углерода.	143
9.4. Молекула триметилфосфина на поверхности кремния	146
Глава 10. Моделирование биосистем.	152
Глава 11. Возможно ли моделировать системы, состоящие из миллионов атомов?	157
Список литературы	162