

**Тематический план лекций к курсу «Молекулярная электроника»  
8 семестр, 34 часа  
Специальность 010801 «Радиофизика и электроника»**

№	Тема	Количество часов
<b>1</b>	Введение. Углеродные кластеры: история обнаружения, технологии производства. Электронное строение углеродных нанокластеров.	<b>4</b>
<b>2</b>	Метод валентного силового поля. Молекулярная механика, молекулярная динамика. Границы применимости.	<b>4</b>
<b>3</b>	Квантово-химические методы. Эмпирические, полуэмпирические, <i>ab initio</i> методы. Метод линейной комбинации атомных орбиталей. Метод молекулярных орбиталей. Полуэмпирический метод расчета электронных состояний многоатомных кластеров: метод Хюккеля. Формирование гамильтониана в $\sigma$ - и $\pi$ -приближении.	<b>4</b>
<b>4</b>	Гамильтониан системы, характеризующейся точечной симметрией. Приведение гамильтониана к блочному виду.	<b>4</b>
<b>5</b>	Математический аппарат теории групп точечной симметрии. Группы симметрии икосаэдра, тетраэдра, низшей симметрии. Неприводимые и приводимые представления. Разложение приводимого электронного представления по неприводимым.	<b>4</b>
<b>6</b>	Построение матрицы симметрии. Методы расчета коэффициентов разложения молекулярной орбитали по атомным орбитам. Метод проекционных операторов.	<b>4</b>
<b>7</b>	Физические свойства углеродных нанотрубок. Проводимость и упругость нанотрубок.	<b>4</b>
<b>8</b>	Функциональные наноустройства. Углеродные наноконпозиты нанотрубка+графен – наноэмиттеры для автокатодов. Многослойные и однослойные трубки – волноводы. Нанотрубки – наноантенны. Нанотрубки – терагерцовые излучатели.	<b>6</b>