

Modelowanie kryształów

—

Wykładowca: **dr Rafał Podeszwa**

Treści merytoryczne:

Podstawy teorii ciała stałego: sieć odwrotna, twierdzenie Blocha, orbitale Blocha. Pasma energetyczne. Periodyczna metoda Hartree-Focka oraz teoria funkcjonałów gęstości. Metody wykorzystujące pseudopotencjały. Metody uwzględniające korelację elektronową. Energia kohezji kryształu. Drgania sieci. Fonony. Kryształy kowalencyjne. Izolatory, półprzewodniki, metale. Kryształy jonowe. Stała Madelunga. Kryształy molekularne. Modelowanie kryształów molekularnych przy użyciu dynamiki molekularnej. Potencjały międzycząsteczkowe. Drgania zerowe w kryształach molekularnych. Oddziaływania van der Waalsa w kryształach molekularnych. Wiązania wodorowe. Sumowanie Ewalda oddziaływań elektrostatycznych. Zjawiska powierzchniowe. Struktura elektronowa powierzchni. Oddziaływanie molekuł z powierzchniami. Adsorpcja fizyczna. Adsorpcja chemiczna. Kataliza heterogeniczna.

Cele przedmiotu:

Przedstawienie podstaw teorii ciała stałego, wybranych metod modelowania kryształów, różnic pomiędzy własnościami poszczególnych klas kryształów, omówienie zalet i wad poznanych metod, zakresu zastosowania oraz kosztu numerycznego w poszczególnych zastosowaniach, omówienie zjawisk powierzchniowych i oddziaływań małych cząsteczek z powierzchniami.

Efekty kształcenia:

Po ukończeniu zajęć student powinien znać podstawowe metody stosowane do opisu układów periodycznych, powinien rozumieć różnice między kryształami kowalencyjnymi, jonowymi i molekularnymi, powinien potrafić wskazać najlepsze metody do opisu poszczególnych klas kryształów, rozumieć zjawiska występujące na powierzchniach, potrafić rozróżnić adsorpcję fizyczną od chemicznej i wskazać właściwy sposób opisu poszczególnych klas oddziaływań molekuł z powierzchniami.

Zalecana literatura:

1. C. Kittel, Wstęp do fizyki ciała stałego, PWN, Warszawa, 1999,
2. A. Groß, Theoretical Surface Science: A Microscopic Perspective, Springer. Berlin, 2003.