**Бибиков, Антон Валентинович.**

**Исследование квантовомеханическими методами влияния химического окружения на электронный захват ядрами в наноструктурах : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.16 / Бибиков Антон Валентинович; [Место защиты: Моск. гос. ун-т им. М.В. Ломоносова]. - Москва, 2018. - 113 с. : ил.**

**Оглавление диссертациикандидат наук Бибиков, Антон Валентинович**

**Оглавление**

**Стр.**

**Введение**

**Глава 1. Распад ядра 7Ве как метод изучения химического**

**окружения — экспериментальные данные и методы расчетов**

**1.1 Обзор экспериментальных данных**

**1.2 Расчеты из первых принципов распада ядра 7Ве в веществе**

**1.3 Метод Хартри-Фока**

**1.4 Использование разложения единицы в методе Хартри-Фока**

**Глава 2. Исследование сходимости по базису расчетов методом Хартри-Фока молекулярных свойств с использованием метода разложения единицы (Ш)**

**2.1 Введение**

**2.2 Теория и реализация метода Ы-ИБ**

**2.2.1 Основы приближения Я1**

**2.2.2 Оценка ошибки Ы-метода**

**2.2.3 Реализация И-КИР метода**

**2.3 Расчеты и обсуждение**

**2.3.1 Полная молекулярная энергия**

**2.3.2 Полная молекулярная энергия многоатомных молекул**

**2.3.3 Параметр точности Я1 для многоатомных молекул**

**2.3.4 Времена счета Ы-КИР метода**

**2.4 Заключение и выводы**

**Глава 3. Апробация метода - поиск материалов для связывания**

**водорода**

**3.1 Введение**

**3.2 Метод расчета**

**3.3 Результаты и обсуждение**

**3.4 Заключение**

**Глава 4. Скорость электронного захвата на 7Be в фуллеренах С60 и С70**

**Стр.**

**4.1 Введение**

**4.2 Исследование в рамках методов, основанных на методе Хартри-Фока**

**4.3 Аналитически точно решаемая модель**

**4.4 Скорость электронного захвата на 7Be в фуллерене C70**

**4.5 Аналогия с отталкивающим кором в а-а и N-N взаимодействиях**

**4.6 Заключение и выводы**

**Глава 5. Скорость электронного захвата на 7Be в фуллерене C36**

**5.1 Процедура расчета**

**5.2 Результаты численных расчетов**

**5.2.1 Энергетические минимумы и равновесные геометрии**

**5.2.2 Электронная плотность на ядре 7Be**

**5.2.3 Влияние деформации C36 на р(0)**

**5.2.4 Обсуждение результатов**

**5.3 Заключение и выводы**

**Глава 6. Исследование влияния размера кластера и давления на**

**скорость электронного захвата на 7Be в металле Be, оксиде BeO и гидроксиде Be(OH)2**

**6.1 Введение**

**6.2 Метод рассчета**

**6.3 Численные расчеты — изменение электронной плотности с изменением размера кластера**

**6.3.1 Кластеры кристаллов металла бериллия и оксида бериллия**

**6.3.2 Модельный расчет — невзаимодействующие фермионы в шаровой потенциальной яме**

**6.4 Численные расчеты — зависимость электронной плотности от давления**

**6.4.1 Фаза вюрцита 7BeO**

**6.4.2 Фаза типа каменной соли 7BeO**

**6.4.3 Скорость распада 7Be в в-фазе кристалла 7Be(OH)2**

**6.5 Заключение и выводы**

**Стр.**

**Заключение**

**Список сокращений и условных обозначений**

**Список литературы**