

Группа численного исследования нанобъектов и наноструктурированных систем



Руководитель группы
к.ф.-м.н, доцент
Вознесенский Михаил Андреевич
каб. 2124
mvoznenskiy@spbu.ru

Анализ результатов физико-химических экспериментов

Разработка описания и проведение моделирование

Оптимизация изучаемых процессов

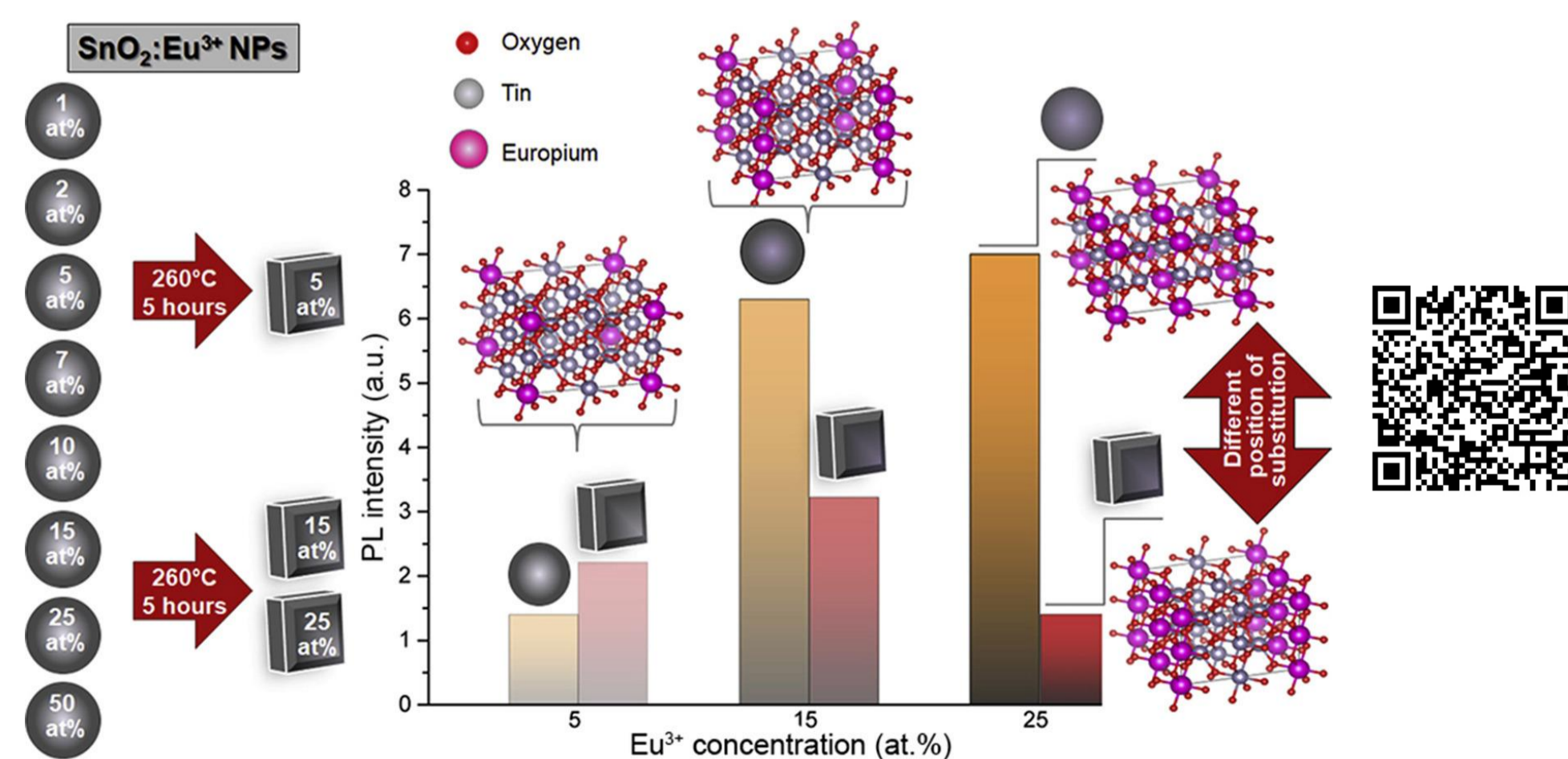
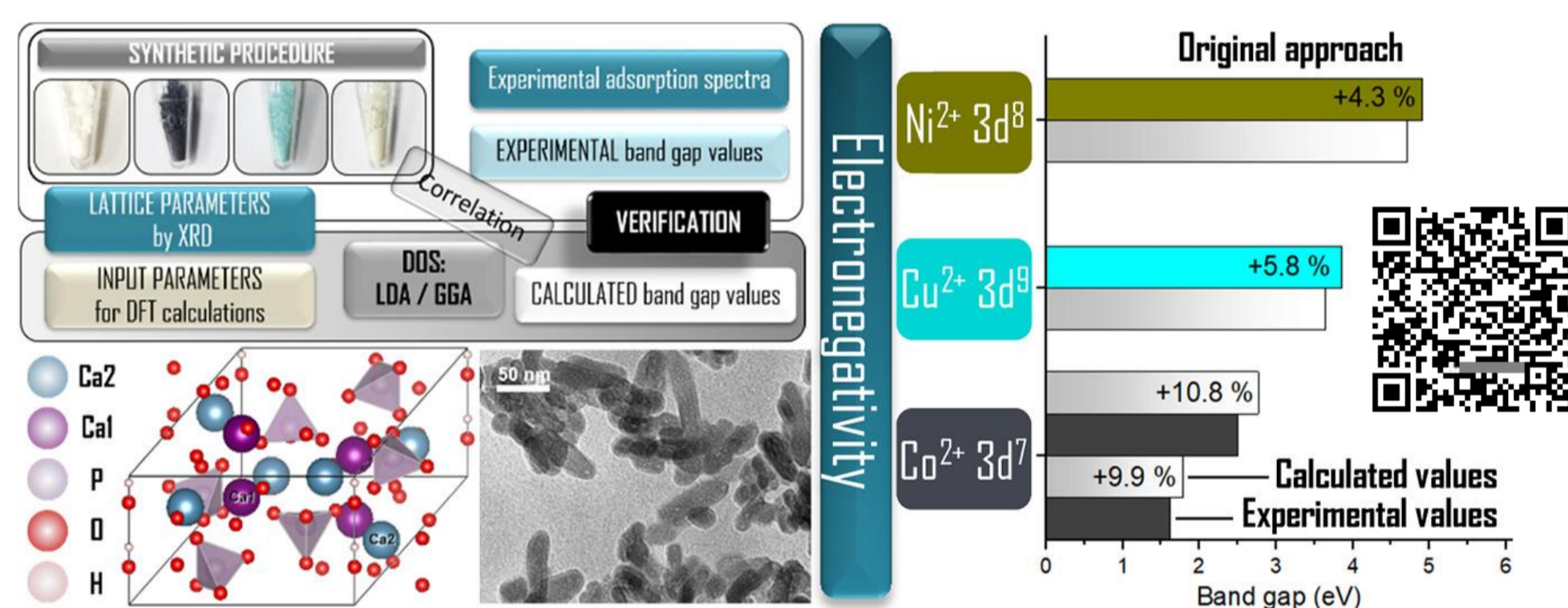
Расчеты электронного строения твердого тела

Решаемые задачи:

Определение положения кислородных вакансий и допантов в кристаллической структуре полупроводников и диэлектриков
Расчет зонной структуры и плотности состояний полупроводников и диэлектриков

Применение результатов:

Определение концентраций тушения люминесценции
Оценка возможной фотокаталитической активности материалов
Разработка рекомендаций по направленному изменению энергетических спектров наночастиц



Изучение взаимодействия поверхности наночастиц с молекулами различной природы

Решаемые задачи:

Разработка расчетной процедуры, обеспечивающей быстрое и максимально корректное определение энергий взаимодействия

Описание взаимодействий компонентов реакционной среды с формирующимися наночастицами

Предсказание активности нанобъектов при взаимодействии с молекулами различной природы

Применение результатов:

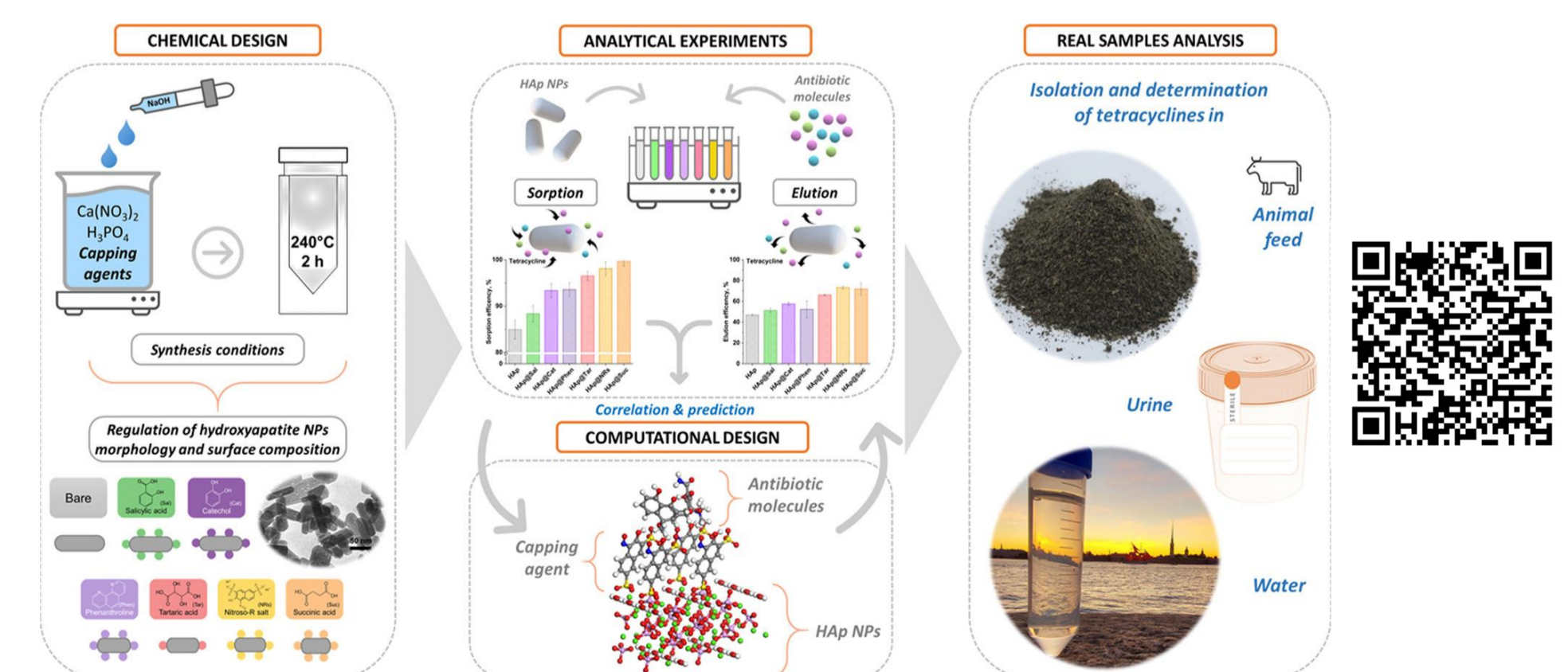
Скрининг исходных реагентов для регулирования параметров наночастиц

Скрининг сорбентов различной природы для выявления материалов с оптимальными характеристиками для выделения конкретных аналитов

Оценка антибактериальной активности фотокатализаторов

Предсказание распределения неорганического компонента в объеме гибридных материалов

Разработка рекомендаций по направленному изменению формы наночастиц для усиления фотокаталитической активности



Моделирование процессов роста наночастиц

Решаемые задачи:

Установление параметров, управляющих процессом формирования наночастиц в различных условиях
Разработка подходов к описанию процессов формирования наночастиц и к предсказанию формы и размера продуктов синтеза

Применение результатов:

Определение параметров синтеза для получения полупроводниковых и диэлектрических наночастиц с заданными размерами и формой

Расчеты магнитных свойств наночастиц

Решаемые задачи:

Моделирование кривых ZFC-FC суперпарамагнитных наночастиц

Определение параметров нанобъектов, оказывающих выраженное влияние на магнитные свойства

Применение результатов:

Описание и предсказание результатов реальных экспериментов

Разработка рекомендаций по составу и параметрам компонентов в материалах сложного строения

