

## Полная исследовательская публикация

Регистрационный код публикации: 8-13-2-18

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>  
УДК 543.539.1:541. Поступила в редакцию 23 декабря 2008 г.

Тематический раздел: Квантовая химия.

Подраздел: Квантово-химические алгоритмы.

# Метод расчета уровней энергии нанообъектов с периодической структурой скелета

© Грибов Лев Александрович

Лаборатория молекулярного моделирования и спектроскопии. Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН. Ул. Косыгина, 19. ГСП-1, г. Москва В-334, 119991. Россия.

Тел.: (495) 137-41-47. E-mail: [gribov@geokhi.ru](mailto:gribov@geokhi.ru)

**Ключевые слова:** нанообъекты, периодическая структура скелета, матричный формализм, электронные и колебательные уровни энергии, метод расчета.

## Аннотация

Предложен метод расчёта электронных и колебательных уровней энергии нанообъектов с периодической внутренней структурой. Метод позволяет в хорошем приближении свести общую задачу к ряду задач порядка, отвечающих повторяющейся совокупности атомов. Дальнейшее уточнение делается методом теории возмущений.