

УДК 536.7 + 541: 539
ББК 24.5
К 58

Рецензенты:

Липанов А.М. – академик РАН, директор Института прикладной механики УрО РАН
Заиков Г.Е. – доктор химических наук, профессор, зав. отделом Института биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН

Кодолов В.И., Хохряков Н.В.

К 58 Химическая физика процессов формирования и превращений наноструктур и наносистем : монография. В 2 т. Т. 2. Математические модели, превращения и свойства наноструктур и наноматериалов / В.И. Кодолов, Н.В. Хохряков. – Ижевск : ФГОУ ВПО Ижевская ГСХА, 2009. – 416 с.

ISBN 978-5-9620-0153-1(Т. 2)
ISBN 978-5-9620-0151-7

В книге рассмотрены актуальные вопросы нанохимии, нанофизики, наноматериаловедения и нанотехнологии. Основное внимание уделяется рассмотрению процессов формирования и превращений наноструктур и наносистем. Приводится обзорный материал по некоторым свойствам наноструктур и наноматериалов, а также по модификации композитов наноструктурами. Рассмотрены методы моделирования наноскопических объектов.

Книга предназначена для специалистов, работающих в области нанотехнологий, студентов старших курсов университетов, магистрантов, аспирантов, работников научно-исследовательских институтов и научно-производственных объединений.

УДК 536.7 + 541: 539
ББК 24.5

ISBN 978-5-9620-0153-1(Т. 2)
ISBN 978-5-9620-0151-7

© Кодолов В.И., Хохряков Н.В., 2009
© ФГОУ ВПО Ижевская ГСХА, 2009

СОДЕРЖАНИЕ

6. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ И ТРАНСФОРМАЦИЙ НАНОСТРУКТУР	3
6.1. Методы атомистического моделирования	3
6.1.1. Первопринципные методы квантовой химии	5
6.1.2. Полуэмпирические методы квантовой химии	11
6.1.3. Полуэмпирический метод сильной связи	13
6.1.4. Расчеты в базисе плоских волн. Псевдопотенциал	15
6.1.5. Энергетические модели эмпирических межатомных потенциалов	17
6.1.6. Молекулярно-механические энергетические модели	24
6.2. Методы квантовохимического моделирования больших атомно-молекулярных систем	28
6.2.1. Особенности моделирования нанообъектов	28
6.2.2. Методы, использующие разделение системы на области	31
Комбинированный метод QM/MM	34
Модели молекулярной системы в растворителе	36
6.2.3. Методы квантовохимических расчетов с линейно растущими затратами	40
6.3. Программные комплексы в области компьютерной химии и материаловедения	43
6.4. Строение углеродных нанотубулярных систем	63
6.4.1. Строение и симметрия идеальной нанотрубки	63
6.4.2. Дефекты в однослойной нанотрубке. Геометрическое строение контактов	78
6.4.3. Геометрия многослойных нанотрубок	92
6.5. Модели процессов образования углеродных наноструктур	103
6.5.1. Проблемы создания универсальной модели	103
6.5.2. Модели процессов синтеза без катализаторов	103
6.5.3. Модели, описывающие каталитический синтез	120
6.5.4. Модели синтеза бамбукообразных наноструктур	139
6.5.5. Модели образования дефектов в структуре нанотрубки	142

6.6. Пространственно-энергетические представления при прогнозировании формирования и превращений наноструктур.....	150
Литература к глава 6.....	157
7. ОСОБЕННОСТИ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ, ПРОТЕКАЮЩИХ В ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЯХ, НА МЕМБРАНАХ И В НАНОРЕАКТОРАХ РАЗЛИЧНЫХ МАТРИЦ.....	170
7.1. Химические реакции, протекающие в поверхностных слоях и на границе раздела фаз.....	170
7.2. Химические процессы на дефектах кристаллов и на мембранах.....	195
7.3. Взаимодействия химических частиц в межслойных пространствах конденсированных систем.....	215
7.4. Химические процессы в нанореакторах.....	229
7.5. Перспективы развития нанохимии и нанометаллургии.....	262
Литература к главе 7.....	272
8. СВОЙСТВА НАНОСТРУКТУР И НАНОКОМПОЗИТОВ. МОДИФИКАЦИЯ КОМПОЗИТОВ НАНОСТРУКТУРАМИ.....	277
8.1. Свойства и превращения наноструктур.....	278
8.1.1. Электронные свойства углеродных наноструктур.....	278
<i>Электронные свойства идеальных однослойных нанотрубок.....</i>	<i>278</i>
<i>Электронные свойства дефектных нанотрубок и контактов.....</i>	<i>295</i>
<i>Экспериментальное исследование контактов нанотрубок.....</i>	<i>305</i>
8.1.2. Эксплуатационные свойства углеродсодержащих наноструктур.....	322
8.2. Теоретические принципы создания нанокмпозитов и модификации композитов наноструктурами.....	337
8.3. Нанокмпозиты, неорганические материалы и полимерные материалы, модифицированные наноструктурами.....	358
Литература к главе 8	384
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	394
СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ И СОКРАЩЕНИЙ.....	409