

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	9
Глава 1. БОРОСОДЕРЖАЩИЕ НАНОСТРУКТУРЫ: ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ И МОДЕЛЬНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ	16
1.1. Общие терминологические сведения	17
1.2. Получение углеродных нанотрубок с примесными атомами бора.....	20
1.3. Экспериментальные исследования углеродосодержащих наноструктур с примесными атомами бора.....	28
1.4. Физико-химические свойства углеродосодержащих наноструктур с примесными атомами бора.....	33
1.5. О влиянии примесных атомов на свойства углеродных нанотрубок	54
1.6. Исследование сорбционных свойств углеродосодержащих наноструктур с примесными атомами бора на примере взаимодействия с атомарным водородом	59
1.7. Выводы к главе 1	65
Глава 2. МЕТОДЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОГО ИССЛЕДОВАНИЯ УГЛЕРОДНЫХ КОМПОЗИТНЫХ НАНОСТРУКТУР	67
2.1. Зонная теория твердых тел.....	68
2.2. Общая характеристика теоретических квантово-химических методов.....	70
2.2.1. Общая характеристика неэмпирических методов.....	70
2.2.2. Общая характеристика полуэмпирических методов.....	73
2.3. Краткая характеристика основных современных полуэмпирических методов	75
2.3.1. Метод INDO	75
2.3.2. Метод MNDO и MNDO-PM/3	75

Оглавление

2.4.	Расчет молекулярных характеристик	79
2.5.	Метод функционала плотности.....	81
2.5.1.	Метод Томаса – Ферми: пример функционала плотности	81
2.5.2.	Теоремы Кона – Хоэнберга	83
2.5.3.	Уравнение Кона – Шэма. Модельная система	84
2.5.4.	Вариационный принцип Кона – Хоэнберга.....	85
2.5.5.	Уравнение Кона – Шэма.....	86
2.5.6.	Обменно-корреляционная энергия	88
2.5.7.	Функционал B3LYP	89
2.6.	Кластерные модели твердых тел, в том числе композитных	91
2.6.1.	Модель молекулярного кластера	91
2.6.2.	Модель квазимолекулярной расширенной элементарной ячейки	94
2.6.3.	Модель циклического кластера	96
2.6.4.	Модель ионно-встроенного ковалентно-циклического кластера	97
2.6.4.1.	Циклические граничные условия	97
2.6.4.2.	Приближение MNDO для циклической системы	98
2.6.4.3.	Учет электростатического взаимодействия кластера с кристаллохимическим окружением	100
2.6.4.4.	Полная энергия ионно-встроенного ковалентно-циклического кластера.....	106
2.6.4.5.	Характеристики зонной структуры твердых тел в модели ИВ-КЦК	107
2.6.5.	Модель кристалла с дефектом.....	108
2.6.6.	Основной вывод по подбору модели для теоретического исследования.....	109

Глава 3. УПРАВЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННЫМИ СВОЙСТВАМИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

С ПОМОЩЬЮ ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ БОРА	111
3.1. Особенности строения и энергетические характеристики углеродосодержащих наноструктур с примесными атомами бора.....	111
3.1.1. Исследование особенностей строения ВС нанотрубок	111

3.1.2.	Электронная структура боросодержащих нанотрубок типа ВС: сопоставление модельного и реального экспериментов	114
3.1.3.	Структура и основные характеристики ВС ₃ нанотрубок	116
3.1.4.	Изучение структурных особенностей углеродных нанотрубок с примесными атомами бора: сопоставление экспериментальных и теоретических данных	121
3.1.5.	Исследование электронно-энергетических характеристик ВС ₅ углеродосодержащих нанотрубок	123
3.1.6.	Получение углеродных нанотрубок с минимальным содержанием примесных атомов бора: экспериментальные и теоретические исследования	126
3.1.7.	Исследование зависимости электронно-энергетических свойств углеродных нанотрубок от концентрации примесных атомов бора: сравнение результатов и промежуточные выводы	128
3.2.	Изучение влияния вакансионных дефектов на полупроводниковые свойства боросодержащих углеродных нанотрубок	132
3.2.1.	Энергетическое строение ВС ₃ нанотрубок с вакансиями.....	133
3.2.2.	Исследование процессов миграций вакансии для углеродных нанотрубок с содержанием примесных атомов бора 25 %.....	137
3.3.	Выводы о влиянии примесных атомов бора на электронные свойства углеродных нанотрубок	142

Глава 4. УПРАВЛЕНИЕ СОРБЦИОННЫМИ СВОЙСТВАМИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В ОТНОШЕНИИ ГАЗОФАЗНЫХ АТОМОВ И МОЛЕКУЛ С ПОМОЩЬЮ ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ БОРА 145

4.1.	Исследование возможности управления процессами сорбции на примере ВС нанотрубок (<i>n, n</i>)-типа	145
4.1.1.	Управление сорбционными свойствами ВС нанотрубок в отношении некоторых газовых атомов.....	145

4.1.2. Изучение возможности сорбции вредных газов на поверхность бороуглеродных нанотрубок типа ВС	155
4.2. Исследование возможности управления адсорбцией на поверхности углеродных BC_3 нанотрубок с примесными атомами бора типа «зигзаг»	159
4.2.1. Управление сорбционными свойствами BC_3 нанотрубок в отношении некоторых газовых атомов и молекул....	159
4.2.2. Изучение возможности сорбции вредных газов на поверхность бороуглеродных нанотрубок BC_3 видов А и Б	173
4.3. Исследование возможности управления заполнением полости УНТ с помощью введения примесных атомов бора	179
4.4. Исследование сорбционных свойств BC_5 нанотрубок	208
4.5. Выводы	212

**Глава 5. УПРАВЛЕНИЕ СВОЙСТВАМИ
УГЛЕРОДОСОДЕРЖАЩИХ НАНОСТРУКТУР
С ПРИМЕСНЫМИ АТОМАМИ БОРА ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ
С АТОМАМИ МЕТАЛЛОВ**

5.1. Изучение влияния примесных атомов бора на внешнюю адсорбцию щелочных металлов в углеродных боросодержащих ВС нанотрубках	215
5.2. Изучение влияния примесных атомов бора на внешнюю адсорбцию щелочных металлов в углеродных боросодержащих BC_3 нанотрубках	219
5.3. Изучение влияния примесных атомов бора на внешнюю адсорбцию щелочных металлов в углеродных боросодержащих BC_5 нанотрубках	222
5.4. Исследование BC_3 нанотрубок (8, 0) видов А и Б, интеркалированных атомами металлов	225
5.5. Исследование BC_5 трубок (6, 0) вида А, заполненных атомами Li, K, Na	230
5.6. Изучение возможности управления сорбционными свойствами углеродных нанотрубок с помощью примесных атомов бора при регулярной адсорбции на их поверхность атомов щелочных металлов	235
5.7. Основные выводы	239

Глава 6. УПРАВЛЕНИЕ ПРОВОДЯЩИМИ СВОЙСТВАМИ ПЛАНАРНЫХ УГЛЕРОДОСОДЕРЖАЩИХ НАНОСТРУКТУР С ПРИМЕСНЫМИ АТОМАМИ	243
6.1. VC_3 нанослои.....	243
6.1.1. VC_3 нанослой: хиральность «зигзаг»	243
6.1.2. VC_3 нанослой: хиральность «кресло»	246
6.2. VC_5 нанослои.....	248
6.3. Сравнительный анализ графеновых нанослоев, содержащих примесные атомы бора.	250
6.4. Изучение влияния вакансионных дефектов на проводящие свойства углеродосодержащих наноструктур с примесными атомами бора	253
6.4.1. Исследование миграции вакансий в беспримесных нанослоях (углеродный, борный).....	254
6.4.2. Исследование миграции вакансий в углеродных нанослоях с различным процентным содержанием бора в них	256
6.5. О возможности использования графеновых нанослоев с примесными атомами бора в качестве фотонных кристаллов	260
6.6. Выводы к главе 6	263
Глава 7. ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ БОРА НА СЕНСОРНЫЕ СВОЙСТВА УГЛЕРОДОСОДЕРЖАЩИХ НАНОСТРУКТУР	265
7.1. Экспериментальные исследования сенсорных свойств углеродных нанотрубок, содержащих примесные атомы бора	265
7.2. Исследование механизма поверхностного модифицирования VC_5 нанотрубок карбоксильной группой	266
7.2.1. Исследование механизма присоединения карбоксильной группы к открытой границе бороуглеродной нанотрубки VC_5	269
7.3. Изучение влияния примесных атомов бора на чувствительность бороуглеродных нанотрубок, модифицированных карбоксильной группой, к молекуле CO_2	271

Оглавление

7.4.	Изучение влияния примесных атомов бора на чувствительность бороуглеродных нанотрубок, модифицированных карбоксильной группой, к атомам щелочных металлов	277
7.4.1.	Взаимодействие карбоксильной группы с углеродными нанотрубками, содержащими 25 % примесных атомов бора	277
7.4.2.	Изучение влияния примесных атомов бора на взаимодействие карбоксилированной бороуглеродной нанотрубки с металлами	279
7.4.3.	Моделирование сенсорной чувствительности углеродных боросодержащих нанотрубок типа BC_3 , модифицированных карбоксильной группой, для выявления наличия металлов на поверхности.....	281
7.5.	Исследование механизма граничного модифицирования боросодержащих нанотрубок аминной и нитрогруппами.....	287
7.6.	Исследование влияния примесных атомов бора на взаимодействие гранично-модифицированных нитро- и аминогруппой углеродных нанотрубок с атомами металлов	290
7.7.	Влияние примесных атомов бора на сенсорные свойства модифицированной амино- и нитрогруппами углеродной нанотрубки (6, 0).....	294
7.8.	Основные выводы	298
ЗАКЛЮЧЕНИЕ		302
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....		311