

Министерство образования и науки РФ  
Алтайский государственный университет

С. А. Безносюк, М. С. Жуковский,  
Л. В. Фомина, О. А. Маслова

# **ОСНОВЫ КОМПЬЮТЕРНОГО ИНЖИНИРИНГА НАНОКОМПОЗИТНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ**

*Монография*



Барнаул

---

Издательство  
Алтайского государственного  
университета  
2014

УДК 541.12:004  
ББК 24.544.32с51  
О-753

**Рецензенты:**

доктор хим. наук, профессор *Н. Г. Базарнова*  
доктор физ.-мат. наук, профессор *В. В. Поляков*

О-753 **Основы компьютерного инжиниринга нанокompозитных катализаторов** [Текст] : монография / Безносюк С. А., Жуковский М. С., Фомина Л. В., Маслова О. А. — Барнаул : Изд-во Алт. ун-та, 2014. — 118 с.

ISBN 978-5-7904-2027-6

В монографии изложены вопросы теории и компьютерных методов моделирования нанокompозитных катализаторов на основе фундаментальных принципов нанoeлектромеxанических систем квантовых автоматов наноботов, последовательно рассмотрены физика квантовых нанoeлектромеxанических систем, математические модели накопления и конверсии энергии квантовыми автоматами наноботами. Дан анализ компьютерного моделирования строения, кинетики релаксации нанокompозитных катализаторов, сформированных квантовыми автоматами наноботами углерода, фрактальных и компактных кластеров металлов, бирадикалов водорода.

Для специалистов в области катализа, нанотехнологий, компьютерного инжиниринга наносистем материалов, а также студентам, магистрантам и аспирантам соответствующих специальностей.

УДК 541.12:004  
ББК 24.544.32с51

*Настоящее издание опубликовано в рамках реализации  
Программы стратегического развития  
Алтайского государственного университета*

ISBN 978-5-7904-2027-6

© Безносюк С. А., Жуковский М. С.,  
Фомина Л. В., Маслова О. А., 2014  
© Оформление. Издательство  
Алтайского государственного  
университета, 2014

# ОГЛАВЛЕНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ .....	3
-------------------	---

## Глава 1

### СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ТЕОРИИ КАТАЛИЗА

И КАТАЛИЗАТОРОВ .....	7
1.1. Основные концептуальные понятия катализа .....	7
1.2. Классификация основных каталитических процессов .....	11
1.3. Основные механизмы действия катализаторов .....	15
1.3.1. Гомогенно-каталитические реакции .....	19
1.3.2. Гетерогенно-каталитические реакции .....	24
1.3.3. Ферментативные реакции .....	32
1.3.4. Реакции межфазного катализа .....	35
1.3.5. Реакции нанокompозитного катализа .....	38

## Глава 2

### ТЕОРИЯ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

ИНЖИНИРИНГА НАНОКОМПОЗИТНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ .....	40
2.1. Квантовые нанoeлектроmеханические системы КАН .....	40
2.2. Энергия квантовых нанoeлектроmеханических систем КАН .....	46
2.3. Релаксация квантовых нанoeлектроmеханических систем КАН .....	49
2.4. Инжиниринг квантовых нанoeлектроmеханических систем КАН нанокompозитных катализаторов .....	56
2.4.1. Топология трансформаций нанокompозитных катализаторов .....	56
2.4.2. Информация инжиниринга нанокompозитных катализаторов .....	58
2.4.3. Импульсный инжиниринг нанокompозитных катализаторов .....	61

## Глава 3

### НАНОКОМПОЗИТНЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ НА ОСНОВЕ

ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ .....	67
3.1. Модельные приближения в расчётах нанокompозитных катализаторов .....	67
3.1.1. Псевдопотенциалы межъядерных связей КАН катализаторов .....	67

---

3.1.2. Электронный привод ядер КАН: метод функционала плотности .....	71
3.1.3. Геометрические характеристики КАН катализаторов .....	75
3.2. Компьютерное моделирование нанокompозитных катализаторов .....	83
3.2.1. Псевдопотенциалы кинематических связей катализаторов .....	83
3.2.2. Расчёт псевдопотенциалов кинематических связей КАН NiH .....	85
3.2.3. Квантово-статистический расчёт термодинамических функций двуядерного кластера NiH нанокompозитного катализатора .....	87
3.3. Самосборка и самоорганизация нанокompозитных катализаторов группы железа .....	90
3.3.1. Расчёт кинематических связей ядер димеров КАН: $Fe_2$ , $Co_2$ , $Ni_2$ .....	90
3.3.2. Самоорганизация нанокompозитного катализатора .....	91
3.3.3. Баллистическая модель самосборки и самоорганизация фрактала нанокompозитного катализатора в методе молекулярной механики.....	93
3.3.4. Диффузионная модель самосборки и самоорганизация фрактала нанокompозитного катализатора в методе Монте-Карло .....	95
3.3.5. Самосборка и самоорганизация кубоида нанокompозитного катализатора в методах молекулярной динамики и нанобот-кинетики .....	102
Заключение .....	106
Библиографический список .....	109

*Научное издание*

С. А. Безносюк, М. С. Жуковский,  
Л. В. Фомина, О. А. Маслова

**ОСНОВЫ КОМПЬЮТЕРНОГО  
ИНЖИНИРИНГА НАНОКОМПОЗИТНЫХ  
КАТАЛИЗАТОРОВ**

*Монография*

Издается в авторской редакции

Подготовка оригинал-макета,  
оформление обложки — *О. В. Майер*

Издательская лицензия ЛР 020261 от 14.01.1997.

Подписано в печать 29.12.2014.

Формат 60x84 1/16. Бумага офсетная.

Усл.-печ. л. 6,9. Тираж 100. Заказ 16.

Типография Алтайского государственного университета:  
656049, Барнаул, ул. Димитрова, 66