

Министерство образования и науки РФ
Алтайский государственный университет

С. А. Безносюк, М. С. Жуковский, Т. М. Жуковская

НАНОИНЖИНИРИНГ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Учебное пособие



Барнаул

Издательство
Алтайского государственного
университета
2013

УДК 541(075.8)
ББК 24.5я73+24.6я73
Б 399

Рецензент:

доктор физ.-мат. наук, профессор АлтГТУ им. И.И. Ползунова
М. А. Баранов

Безносюк, С. А.
Б 399 **Наноинжиниринг функциональных материалов** [Текст] : учебное пособие / С. А. Безносюк, М. С. Жуковский, Т. М. Жуковская. — Барнаул : Изд-во Алт. ун-та, 2013. — 176 с.

ISBN 978-5-7904-1399-5

Даны теоретические основы наноинжиниринга функциональных материалов нового поколения. Рассмотрены современные методы компьютерного моделирования субфемтосекундной импульсной самосборки и самоорганизации открытых энергонасыщенных наночастиц — наноботов — активных элементов функциональных наносистем. Проанализирована компьютерная имитация процессов формирования в конденсированной среде функциональных материалов активных элементов. В качестве примера рассмотрены наночастицы графена, углеродных аккумуляторов водорода, переходных и благородных металлов.

Для магистрантов, аспирантов и специалистов в области нанофизики, нанохимии и нанобиодизайна новых функциональных материалов. Разделы пособия могут быть использованы в учебных программах «Компьютерная нанотехнология», «Наноинжиниринг функциональных и биомиметических материалов».

УДК 541(075.8)
ББК 24.5я73+24.6я73

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

ISBN 978-5-7904-1399-5

© С. А. Безносюк, М. С. Жуковский,
Т. М. Жуковская, 2013
© Оформление. Издательство
Алтайского государственного
университета, 2013

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	3
Введение	6

Глава 1

ТЕОРИЯ И КОМПЬЮТЕРНЫЕ МЕТОДЫ ИМИТАЦИИ

КВАНТОВОЙ ЭВОЛЮЦИИ НЕРАВНОВЕСНЫХ НАНОЧАСТИЦ 16

1.1. Общая квантовая теория наночастиц	16
1.2. Квазистационарная квантовая релаксация наночастиц	19
1.3. Методы компьютерного моделирования наночастиц.....	21
1.3.1. Релаксация наночастиц в методе молекулярной механики	21
1.3.2. Релаксация наночастиц в методе Монте-Карло	24
1.3.3. Релаксация наночастиц в методе молекулярной динамики	26
1.3.4. Применение моделей клеточных автоматов для имитации самосборки и самоорганизации наносистем	29
1.3.5. Физическая модель нанобота конденсированного состояния	34

Глава 2

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ ОТКРЫТЫХ СИСТЕМ НАНОБОТОВ..... 47

2.1. Квантово-полевая концепция релаксации активной открытой наночастицы	47
2.2. Когерентная конверсия энергии нанобота	52
2.3. Диссипация энергии нанобота.....	58
2.4. Кинетика релаксации наноботов.....	63

Глава 3

КВАНТОВЫЕ ДИССИПАТИВНЫЕ НАНОСТРУКТУРЫ..... 66

3.1. Генезис и мультитрансформации квантовых диссипативных структур наноботов	66
3.2. Расчет энергии систем наноботов в методе нелокального функционала плотности	70
3.3. Топология электронных связей в квантовой диссипативной структуре открытых наносистем.....	73
3.4. Теория процессинга неравновесных систем наноботов в представлении матриц плотности	77
3.5. Модели квантово-запутанного процессинга открытых наносистем в представлении матриц плотности.....	79

- 3.6. Компьютерная модель релаксации наноботов..... 86
3.7. Компьютерное моделирование процессов релаксационной
самосборки и самоорганизации систем наноботов..... 89

Глава 4

САМОСБОРКА И САМООРГАНИЗАЦИЯ КВАНТОВЫХ ДИССИПАТИВНЫХ СТРУКТУР БИРАДИКАЛОВ ВОДОРОДА

- В НАНОТРУБКЕ УГЛЕРОДА** 94
4.1. Системы наноботов бирадикала водорода 94
4.2. Компьютерное моделирование самосборки
и самоорганизации сорбции бирадикалов нанотрубкой углерода 98
4.3. Хаотическая самосборка и самоорганизация диссипативных
наноструктур бирадикалов водорода в нанотрубке углерода 100

Глава 5

САМОСБОРКА И САМООРГАНИЗАЦИЯ НАНОБОТОВ

- УГЛЕРОДА** 104
5.1. Открытая самоорганизация мономерных наноботов графена..... 104
5.1.1. Компьютерное моделирование фемтосекундного
процессинга перфорированного листа нанографена 104
5.1.2. Анализ результатов компьютерного моделирования
фемтосекундного процессинга перфорированных
листов нанографена 106
5.2. Самосборка и самоорганизация
открытых наногелей углерода 110
5.2.1. Компьютерная модель самосборки открытых
наногелей кубических кластеров углерода
в субмикронных порах 110
5.2.2. Три морфологических типа самоорганизации
открытых наногелей углерода 112

Глава 6

САМОСБОРКА И САМООРГАНИЗАЦИЯ СИСТЕМ

- НАНОБОТОВ МЕТАЛЛОВ**..... 117
6.1. Самосборка и самоорганизация наноботов серебра
на углеродном полимере 117
6.1.1. Компьютерное моделирование квантовых
диссипативных наноструктур открытых наносистем
серебра 117
6.1.2. Методика эксперимента и обоснование расчетной
модели 119

6.1.3. Компьютерный наноинжиниринг синтеза мономерных и полимерных наноботов серебра.....	121
6.2. Самосборка и самоорганизация полимерных фрактальных покрытий никеля в нанопорах	126
6.2.1. Компьютерная модель синтеза полимерных фрактальных структур наноботов никеля в нанопорах	126
6.2.2. Синтез фрактального покрытия наноботов Ni из активного центра на поверхности и в объеме нанопоры.....	129
6.2.3. Синтез фрактального покрытия наноботов Ni из активных центров одной грани нанопоры.....	131
6.2.4. Синтез фрактального покрытия наноботов Ni из активных центров двух граней нанопоры.....	133
6.3. Самоорганизация мономерных компактных наноботов никеля .	137
6.3.1. Мультитрансформерность аттракторов открытой релаксации мономерных наноботов никеля	137
6.3.2. Мультикинетика релаксации мономерных наноботов никеля при различной нуклеарности и температуре.....	140
6.3.3. Устойчивость симметричных форм мономерных наноботов никеля при фемтохронной релаксации	142

Глава 7

МНОГОУРОВНЕВЫЙ НАНОИНЖИНИРИНГ ЭЛЕКТРОДОВ- КАТАЛИЗАТОРОВ ВОДОРОДНЫХ ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ.....	145
7.1. Компьютерный наноинжиниринг электродов-катализаторов водородных топливных элементов на основе наноботов водорода, углерода и металлов.....	145
7.2. Компьютерное моделирование полимерных наносистем никель-водород на электродах топливных элементов	148
7.3. Компьютерное моделирование процессинга бирадикалов водорода электродом-катализатором.....	152
Заключение	155
Библиографический список	158

Учебное издание

Сергей Александрович Безносюк,
Марк Сергеевич Жуковский,
Татьяна Михайловна Жуковская

НАНОИНЖИНИРИНГ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Учебное пособие

Редактор *Е. М. Федяева*
Подготовка оригинал-макета — *О. В. Майер*

Издательская лицензия ЛР 020261 от 14.01.1997 г.
Подписано в печать 02.09.2013.
Формат 60x84/16. Бумага офсетная. Печать трафаретная.
Усл.-печ. л. 10,23. Тираж 100. Заказ 222.

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