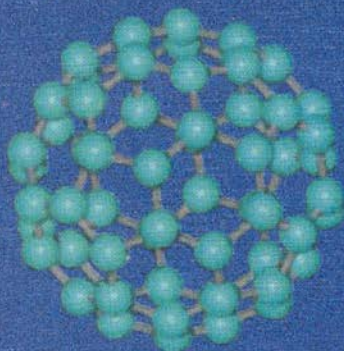


В. Н. Пискунов, И. А. Давыдов, К. Б. Жогова

---

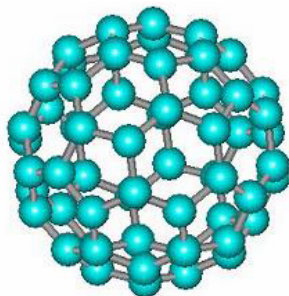
# **ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ. ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА И МЕТОДЫ РАСЧЕТА**



В. Н. Пискунов, И. А. Давыдов, К. Б. Жогова

---

# **ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ. ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА И МЕТОДЫ РАСЧЕТА**



2005

ФГУП “РОССИЙСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ЯДЕРНЫЙ  
ЦЕНТР – ВНИИЭФ”

В. Н. Пискунов, И. А. Давыдов, К. Б. Жогова

---

**ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ.  
ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА  
И МЕТОДЫ РАСЧЕТА**

Учебное издание

Саров, 2005

УДК 539.21+546.16+546.26

ББК 24.124 + 22.37

ПЗ4

**Пискунов В. Н., Давыдов И. А., Жогова К. Б.**

Фуллерены и нанотрубки. Основные свойства и методы расчета.  
Учебное издание. – Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2005. – 92 с.: ил.

ISBN 5-9515-0060-5

Приведены данные о недавно открытых химически стабильных кластерах углерода, получивших названия фуллеренов и нанотрубок, а также основные сведения о структуре и физико-химических свойствах этих наноматериалов, которые обуславливают широкие перспективы их применения, в том числе и в атомной отрасли. Рассмотрены основные теоретические модели и методы, использующиеся при моделировании кинетики образования ультрадисперсных (нано-) материалов и теоретическом описании их основных свойств. Приведены основные характеристики программы “HyperChem”, разработанной для численного расчета физико-химических свойств кластерных систем с иллюстрацией содержательных примеров применения этой программы для расчетов энергетических характеристик кластеров углерода и азота и колебательных спектров различных двухатомных молекул.

Книга предназначена для студентов и аспирантов вузов, а также для специалистов, работающих в области новых технологий, теории твердого тела, физикохимии наноразмерных объектов и математического моделирования поверхностных и кластерных систем.

Утверждено редсоветом СарФТИ в качестве учебного издания

ISBN 5-9515-0060-5

© ФГУП “Российский федеральный  
ядерный центр – ВНИИЭФ”, 2005

# ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ .....	4
1. Фуллерены: история открытия, перспективы применения .....	6
1.1. Фуллерены – новая аллотропная модификация углерода .....	6
1.2. История открытия фуллеренов .....	7
1.3. Производство фуллеренов .....	9
1.4. Структура, физические и химические свойства .....	16
2. УГЛЕРОДНЫЕ НАНОТРУБКИ .....	26
2.1. Структура нанотрубок .....	26
2.2. Получение и свойства нанотрубок .....	28
2.3. Перспективы применения материалов на основе фуллеренов и нанотрубок .....	37
3. РАСЧЕТНО-ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ УЛЬТРАДИСПЕРСНЫХ (НАНО-) МАТЕРИАЛОВ ...	42
3.1. Обзор теоретических методов исследования .....	42
3.2. Описание метода молекулярных орбиталей и основных методов компьютерной химии .....	48
3.3. Метод МО для твердого тела .....	53
3.4. Описание метода молекулярной механики .....	60
4. ОПИСАНИЕ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОГО ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА “HYPERCHEM” И РАСЧЕТЫ ПАРАМЕТРОВ ФУЛЛЕРЕНОВ .....	66
4.1. Описание программы “HyperChem” .....	67
4.2. Краткое описание методов расчета .....	71
4.3. Примеры задания исходных данных и результаты расчетов .....	79
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ .....	86

Лай Синьчунь (2001с). Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук. М.: МИФИ, 2001.

Лозовик Ю. Е., Попов А. М. (1997)//УФН. 1997. Т. 167, № 7. С. 751.

Лозовик Ю. Е., Попов А. М. (1995)//Теплофизика высоких температур. 1995. Т. 33, № 4. С. 539–545.

Мастеров В. Ф. (1997). Физические свойства фуллеренов//Соросовский образовательный журнал. 1997. № 1. С. 92–99.

Минкин В. И., Симкин Б. Я., Миняев Р. М. (1997). Теория строения молекул. Ростов-на-Дону: “Феникс”, 1997.

Нерушев О. А., Сухинин Г. И. (1997)//ЖТФ. 1997. Т. 67, № 2. С. 41–49.

Переходцев Г. Д. (1997). Спин-спиновые взаимодействия в свободно-радикальных кластерах: Дис. канд. физ.-мат. наук. М., 1997.

Поклонский Н. А. и др. (2000)//Физика твердого тела. 2000. Т. 10. С. 1911.

Пономарев А. Н. (1999)//Индустриальный Петербург. 1999. № 5(17). С. 80–82.

Романов А. Е. и др. (2000)//Физика твердого тела. 2000. Т. 8. С. 1525.

Сидоров Л. Н., Болталинина О. В. (1997). От масс-анализа многоатомных кластеров углерода к синтезу фуллеренопроизводных//Соросовский образовательный журнал. 1997. № 11. С. 35–39.

Сидоров Л. Н. (1998). Газовые кластеры и фуллерены//Соросовский образовательный журнал. 1998. № 3. С. 65–71.

Смогунов А. Н. и др. (2000)//Физика твердого тела. 2000. Т. 10. С. 1848.

Смолли Р. Е. (1998). Открывая фуллерены//УФН. 1998. Т. 168, № 3. С. 323–330.

Соколов В. И. (1993). Проблема фуллеренов: химический аспект//Изв. АН. Сер. Химическая. 1993. № 1. С. 10–19.

Соколов В. И., Станкевич И. В. (1993). Фуллерены – новые аллотропные формы углерода: структура, электронное строение и химические свойства// Успехи химии. 1993. Т. 62, № 5. С. 455–472.

Соколов В. И. (1999). Химия фуллеренов – новых аллотропных модификаций углерода// Изв. АН. Сер. Химическая. 1999. № 7. С. 1211–1218.

- Станкевич И. В. и др. (1984)//Успехи химии. 1984. LIII, № 7. С. 1101.
- Станкевич И. В., Никеров М. В., Бочвар Д. А. (1984)//Там же. 1984. Т. 53. С. 640.
- Станкевич И. В., Сэто Р. (2001)// Физика твердого тела. 2001. № 10. С. 1916.
- Томилин Ф. Н. и др. (2001)//Там же. 2001. № 5. С. 936.
- Уайтсайде Дж., Эйглер Д., Андерс Р. и др. (2002). Нанотехнологии в ближайшем десятилетии. Прогноз направления исследований: Пер. с англ. /Под ред. М. К. Роко, Р. С. Уильямса, П. Аливисатоса. М.: Мир, 2002.
- Фурсиков П. В. Тарасов Б. П. (2004)//Альтернативная энергетика и экология. 2004. № 10. С. 24.
- Харрис П. (2003). Углеродные нанотрубы и родственные структуры. Новые материалы XXI века: Пер. с англ. М.: Техносфера, 2003.
- Хоффман Р. (1990). Строение твердых тел и поверхностей. М.: Мир, 1990.
- Nanocomposite Science and Technology/Edited by P. M. Ajayan, L. S. Schadler, P. V. Braun. WILEY-VCH Verlag GmbH Co. KGaA, Weinheim, 2003.
- Aree T., Hannongbua S. (1997)//J. Phys. Chem. 1997. A. Vol. 101. P. 5551.
- Binkley J. S., Pople J. A., Hehre W. J. (1980)//J. Am. Chem. Soc. 1980. Vol. 102. P. 939.
- Blank V. D. et al. (1995)//Phys. Lett. A. 1995. Vol. 205. P. 208.
- Bloch P. E., Parinello M. (1992)//Phys. Rev. 1992. B45. Vol. 11. P. 9413.
- Breton J., et al. (1993)//J. Chem. Phys. 1993. Vol. 99, N 5. P. 4036.
- Bulusheva L. G. et al. (1997)//J. Phys. Chem. 1997. A101. P. 10018.
- Bulusheva L. G., Okotrub A. V. (2001). Book of Abstr. 5th IWFAC. 2001, St. Petersburg, Russia. P. 75.
- Car R., Parinello M. (1985)//Phys. Rev. Lett. 1985. Vol. 55, N 22. P. 2471.
- Chang A.H.H. et al. (1991a)//J. Chem. Phys. 1991. Vol. 94, N 7. P. 5004.



Chang A.H.H. et al. (1991b)//Ibid. 1991. Vol. 95, N 23. P. 9288.

Cioslowski J. et al. (1991)//Ibid. 1991. Vol. 94, N 5. P. 3730.

Collins J. B., Schleyer P. V., Binkley J. S., Pople J. A. (1976)//Ibid. 1976. Vol. 64. P. 5142.

De Proft F. et al. (1996)//J. Phys. Chem. 1996. Vol. 100, N 18. P. 7440.

Dewar M. J. S., Thiel W. (1977). Ground states of molecules. 38. The MNDO method. Applications and parameters//J. Am. Chem. Soc. 1977. Vol. 99, N 15. P. 4899–4907.

Dewar M. J. S., Thiel W. (1977). Ground states of molecules. 39. MNDO results for molecules containing hydrogen, carbon, nitrogen and oxygen//Ibid. 1977. Vol. 99, N 15. P. 4907–4917.

Dewar M. J. S., Zebisch E. G., Healy E. F. et al. (1985). AM1: a new general purpose quantum mechanical molecular model//Ibid. 1985. Vol. 107, N 15. P. 3902–3909.

Domrachev G. A. et al. (2001). Book of Abstr. 5th IWFAC. 2001. St. Petersburg, Russia. P. 328.

Domrachev G. A. et. al. (1995). IV Intern. Conf. on Advanced Materials, Aug. 27 – Sept. 1, 1995, Mexico, Cancun, Abstracts, S. 14.

Ekaradt W. (1984)//Phys. Rev. 1984. B29. P. 1558.

Gordon M. S., Binkley J. S., Pople J. A. et al (1982)//J. Am. Chem. Soc. 1982. Vol. 104. P. 2797.

Gordon M. S., (1980)//Chem. Phys. Lett. 1980. Vol. 76. P. 163.

Hariharan P. C., Pople J. A. (1973)//Theor. Chim. Acta. 1973. Vol. 28. P. 213.

Hehre W. J., Stewart R. F., Pople J. A. (1969)//J. Chem. Phys. 1969. Vol. 51. P. 2657.

Hehre W. J., Ditchfield R., Pople J. A. (1972)//Ibid. 1972. Vol. 56. P. 2257.

Iijima S. (1991)//Nature. 1991. Vol. 354. P. 56.

Jones D.E.H. (1966)// New Scientist. 1966. Vol. 32. P. 245.

Kratschmer W., Lamb L. D., Fostiropoulos B., Huffman D. R. (1990)//Nature. 1990. Vol. 347. P. 345.

Krishnan R., Kinkley J. S., Seeger R., Pople J. A. (1980)// J. Chem. Phys. 1980. Vol. 72. P. 650.

Kroto H. W., Heath J. R., O' Brien S. C. et al. (1985)// Nature. 1985. Vol. 318. P. 162.



- Maruyama S., Yamaguchi Y. (1995)//Therm. Sci. Eng. 1995. Vol. 3. P. 105.
- Maruyama S., Yamaguchi Y. (1998)//Chem. Phys. Lett. 1998. Vol. 286. P. 336.
- Maruyama S. et al. (1996)//Sci. Rep. RITU A41. 1996. Vol. 2. P. 183.
- McLean A. D., Chandler G. S. (1980)//J. Chem. Phys. 1980. Vol. 72. P. 5639.
- Mintmire J. W., Dunlap B. I., White C. T.(1992)//Phys. Rev. Lett. 1992. Vol. 68. P. 631.
- Moron M. et al. (1998)// Semicond. Sci. Technol. A. 1998. Vol. 13. P. 51.
- Moron M. et al. (1997)//Phys. Rev. Lett. 1997. Vol. 79. P. 4453.
- Okotrub A. V. (1999). Book of Abstr.4th IWFAC. 1999, St. Petersburg, Russia. P. 110.
- Okotrub A.V. et al. (1997)//Phys Low-Dim. Struct. 1997. Vol. 5, N 6. P. 103.
- Osawa E. (1970)//Kagaku. 1970. Vol. 25. P. 854.
- Pang L., Brisse F. (1993)//J. Phys. Chem. 1993. Vol. 97, N 33. P. 8562.
- Patchkovskii S., Thiel W. (1997)//J. Chem. Phys. 1997. Vol. 106, N 5. P. 1796.
- Pietro W. J., Franci M. M., Hehre W. J. et al. (1982)//J. Am. Chem. Soc. 1982. Vol. 104. P. 5039.
- Rohlfing E. A., Cox D. M., Kaldor A. J. (1984)//Chem. Phys. 1984. Vol. 81. P. 3322.
- Schmalz T. G., Klein D. J. (1993). In: Buckminsterfullerenes / Ed. By W. Edward Billups, Marco A. Ciufolini. VCH, N. Y. P. 83. 1993.
- Scuseria G. E. (1993). In: Buckminsterfullerenes / Ed. by W. Edward Billups, Marco A. Ciufolini. VCH, N.Y. P. 103. 1993.
- Stewart J. J. P. (1989). Optimization of parameters for semiempirical methods I. Method//J. Comput. Chem. 1989. Vol. 10, N 2. P. 209–220.
- Stewart J. J. P. (1989). Optimization of parameters for semiempirical methods II. Applications//Ibid. 1989. Vol. 10, N 2. P. 221–264.
- Stewart J. J. P. (1990). Mopac: a semiempirical molecular orbital program//J. Comput.-Aided Mol. Des. 1990. Vol. 4, N 1. P. 1–105.

Stewart J. J. P. (1991). Optimization of parameters for semiempirical methods III. Extensions of PM3 to Be, Mg, Zn, Ga, Ge, As, Se, Cd, In, Sn, Sb, Te, Hg, Tl, Pb, and Bi//J. Comput. Chem. 1991. Vol. 12, N 3. P. 320–341.

Stewart R. F. (1970)//J. Chem. Phys. 1970. N 52. P. 431.

Terrans H., Mackay A. L. (1997). Prog. Crystal Growth and Charact. 1997. 34, 1, 25.

Thiel W., Voityuk A. A. (1996). Extension of MNDO to d orbitals: parameters and results for the second-row elements and for zinc group//J. Phys. Chem. 1996. Vol. 100, N 2. P. 616–626.

Weaver J. H. et al. (1992)//Chem. Phys. Lett. 1992. Vol. 190. P. 460.

Weaver J. H. (1992)//Acc. Chem. Res. 1992. Vol. 25, N 3. P. 143.

White C. T. et al. (1993). In: Buckminsterfullerenes / Ed. by W. Edward Billups, Marco A. Ciuffolini. VCH, N. Y. 125. 1993.

**Пискунов Владимир Николаевич,  
Давыдов Иван Александрович, Жогова Кира Борисовна**

**ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ.  
ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА И МЕТОДЫ РАСЧЕТА**

Учебное издание

Редактор *В. М. Тагирова*  
Корректор *Н. Ю. Костюничева*  
Компьютерная подготовка оригинала-макета *В. М. Князькова*

---

Подписано в печать 21.07.2005. Формат 60×90/16  
Печать офсетная. Усл. печ. л. 5,5 Уч. изд. л. ~5  
Тираж 150 экз. Зак. тип. 932-2005

---

Отпечатано в Издательско-полиграфическом комплексе  
ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»  
607190, г. Саров Нижегородской обл.