**Кепп, Олег Михайлович.**

## Квантовая химия углеродных нанотрубок с переходными металлами : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.04. - Москва, 1999. - 140 с.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Кепп, Олег Михайлович

ОГЛАВЛЕНИЕ

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ

глава 1. Сведения об углеродных нанотрубках

1.1. Способы получения

1.2. Данные о свойствах нанотрубок

1.3. Аспекты применения нанотрубок

1.4. Данные квантовохимических исследований

углеродных нанотрубок

1.5. Метод линеаризованных присоединенных плоских полн

глава 2. Электронное строение некоторых полимеров

и легированных металлами углеродных нанотрубок по данным метода линеаризованных присоединенных плоских волн для квазиодномерных систем

2.1. Метод линеаризованных присоединенных плоских волн для квазиодномерных систем

2.1.1. Потенциал в простейшем,

так называемом muffin-tin приближении

2.1.2. Базисные волновые функции

2.1.3. Секулярное уравнение

2.2. Электронное строение простых полимеров

2.2.1. Поли(/2<я/?я-фенилен)

2.2.2. Поли(г/ис-бутадиен)

2.2.3. Полиэтилен

2.2.4. Обсуждение результатов

2.3. Легированные фуллереновые нанотрубки

2.3.2. Плотности электронных состояний в трубках

Влияние щелочного и щелочноземельного металла

Влияние переходного металла

2.3.3. Зонная структура и ограничения метода

глава 3. Метод линейных присоединенных цилиндрических волн для

электронной структуры нанопроводов

3.1. Вид волновых функций

3.2. Условия сшивки для базисных функций на границе МТ-области

3.2.1. Условие неразрывности базисных волновых функций

на границе muffin-tin области

3.2.2. Условие непрерывности первых радиальных производных базисных волновых функций

3.2.3. Свойства интегралов /у и 12

3.2. Интеграл перекрывания

для присоединенных цилиндрических волн

3.3. Матричные элементы гамильтониана

3.4. Парциальные заряды

глава 4. Применения метода линейных присоединенных

цилиндрических волн

4.1. Электронная структура простейших неорганических полимеров

на примере карбина

4.2. Цепочки из атомов металлов - металлические подсистемы легированных углеродных нанотрубок

4.2.1. Цепочки атомов металлов без альтернирования длин связей

4.2.2. Цепочки атомов металлов с альтернированием длин связей

4.2.3. Влияние радиуса цилиндрической области на характер электронной структуры металлических цепочек

4.2. Электронная структура углеродных нанотрубок, легированных

переходными металлами

выводы

литература