

Представление докторской диссертации на тему:
**«Механизмы образования, адсорбционные и физико-химические свойства
фуллеренов и некоторых нанотрубок»**

Тезисы доклада

А.С. Федоров

1. Была разработана и апробирована модель, позволяющая определять вероятность образования, а также роль основных факторов, влияющих на образование фуллеренов и эндоэдральных металлофуллеренов в углерод-содержащей плазме. Впервые было учтено влияние зарядов кластеров, роль нейтрального буферного газа (гелий, аргон), а также параметров плазмы (температура, электронная концентрация). Были определена область оптимальных для синтеза параметров плазмы. На примере расчетов образования эндоэдральных металлофуллеренов $Me@C_{84}$ ($Me = Sc, Fe, Pt$) было показано, что на вероятность их образования существенно влияют как потенциал ионизации атома металла, так и время жизни кластеров металл-углерод.
2. Был предложен оригинальный метод, облегчающий проведение расчетов однослойных нанотрубок, в частности -однослойных углеродных нанотрубок (ОУНТ) . Метод заключается в изменении геометрии рассчитываемой структуры путем искусственного разбиения нанотрубки на секторы и разворачивания их вдоль одной плоскости с введением соответствующих граничных условий. Показано, что это позволяет весьма (на 1-3 порядка) сократить время расчетов при минимальных вносимых погрешностях.
3. Было рассчитано поведение молекул изотопов водорода внутри узких углеродных нанотрубок (УНТ). Показано, что учет квантовых свойств молекул водорода является важным фактором и продемонстрировано, что внутри таких УНТ можно добиться очень значительного разделения (на 2 порядка) легких молекул изотопов по скоростям.
4. Оригинальным методом было получено уравнение состояния адсорбированного на поверхности УНТ молекулярного водорода при различных давлениях и температурах и найдена зависимость равновесной концентрации адсорбированных молекул H_2 в зависимости от этих условий. Показано, что концентрация H_2 будет испытывать серию фазовых переходов в зависимости от давления и температуры.
5. При различных температурах и давлениях рассчитана равновесная плотность водорода, который химически сорбируется на поверхности связанных между собой кластере платины и ОУНТ (явление spillover). Рассчитаны энергии адсорбции атомов водорода на обеих поверхностях, а также хим.потенциалы водорода в газе и на этих поверхностях. В рамках теории переходного состояния рассчитаны скорости перескоков атомов водорода по поверхности платины и ОУНТ, а также перескоки атомов H с платины на УНТ. Показано,

что для температур в диапазоне ($300\text{ K} < T < 900\text{ K}$) и давлений водорода ($P < 500\text{ бар}$) он химически сорбируется на поверхности платины, а его доля на УНТ весьма мала. Но при наличии вакансий в структуре УНТ и температуре $T < 450\text{ K}$ атомы водорода достаточно эффективно адсорбируются на этих вакансиях.

6. Предложена структура новых НТ на основе BeO и исследованы различные НТ из SiO_2 . Из *ab-initio* расчетов рассчитаны электронная структура и упругие свойства некоторых таких НТ. Показано, что все эти трубки являются широкозонными диэлектриками. Установлено, что BeO трубки обладают модулем Юнга составляющим $\sim 70\%$ от величины такого модуля для УНТ. Для SiO_2 НТ было показано, что ширину диэлектрической щели в них можно существенно изменять под действием продольной деформации.