

БНТУ

Научная библиотека



И. П. Суздальев

# НАНОТЕХНОЛОГИЯ

Физико-химия  
нанокластеров, наноструктур  
и наноматериалов

Издание стереотипное



775(3)



URSS

МОСКВА

# Оглавление

К читателю (Ю. Д. Третьяков) . . . . .	8
Предисловие . . . . .	9
<b>Глава 1. Классификация и методы получения нанокластеров и наноструктур . . . . .</b>	<b>16</b>
1.1. Молекулярные кластеры . . . . .	16
1.2. Газовые безлигандные кластеры . . . . .	17
1.2.1. Источники получения кластеров . . . . .	18
1.2.2. Масс-спектрометры и детектирование кластеров . . . . .	23
1.3. Коллоидные кластеры . . . . .	26
1.4. Твердотельные нанокластеры и наноструктуры . . . . .	28
1.5. Матричные нанокластеры и супрамолекулярные наноструктуры . . . . .	30
1.6. Кластерные кристаллы и фуллериты . . . . .	32
1.7. Компактированные наносистемы и нанокомпозиты . . . . .	32
1.8. Тонкие наноструктурированные пленки . . . . .	34
1.9. Углеродные нанотрубки . . . . .	37
<b>Глава 2. Методы исследования . . . . .</b>	<b>40</b>
2.1. Дифракция электронов . . . . .	40
2.1.1. Дифракция медленных электронов . . . . .	41
2.1.2. Дифракция отраженных быстрых электронов . . . . .	46
2.2. Полевые методы . . . . .	47
2.2.1. Полевой электронный микроскоп . . . . .	47
2.2.2. Полевой ионный микроскоп . . . . .	50
2.3. Сканирующая зондовая микроскопия . . . . .	54
2.3.1. Сканирующая туннельная микроскопия . . . . .	54
2.3.2. Атомно-силовая и магнитно-силовая микроскопия . . . . .	57
2.4. Рентгеновская спектроскопия и дифракция . . . . .	60
2.4.1. Рассеяние на аморфных и частично упорядоченных объектах. Малоугловое рентгеновское рассеяние . . . . .	65
2.4.2. Рентгеновская спектроскопия поглощения: EXAFS, XANES, NEXAFS . . . . .	66
2.5. Электронная спектроскопия . . . . .	69
2.5.1. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия . . . . .	69
2.5.2. Ультрафиолетовая электронная спектроскопия . . . . .	73
2.5.3. Электронная Оже-спектроскопия . . . . .	78
2.6. Оптическая и колебательная спектроскопия . . . . .	83

2.6.1. Оптическая спектроскопия . . . . .	83
2.6.2. Колебательная спектроскопия . . . . .	87
2.7. Мессбауэровская (гамма-резонансная) спектроскопия . . . . .	93
2.7.1. Адсорбционная и эмиссионная МС . . . . .	95
2.7.2. Рэлеевское рассеяние мессбауэровского излучения . . . . .	100
2.7.3. Мессбауэровская спектроскопия конверсионных электронов . . . . .	102
2.7.4. Временная МС резонансного рассеяния вперед . . . . .	103
2.7.5. Неупругое ядерное резонансное рассеяние . . . . .	106
2.8. Методы радиоспектроскопии . . . . .	108
2.8.1. Ядерный магнитный резонанс . . . . .	109
2.8.2. Электронный парамагнитный резонанс . . . . .	111
<b>Глава 3. Поверхность твердых тел. Микроскопические аспекты . . . . .</b>	<b>115</b>
3.1. Атомные и молекулярные орбитали . . . . .	115
3.2. Поверхность монокристаллов, нанокластеров и пористых сорбентов . . . . .	119
3.3. Примесные атомы на поверхности . . . . .	122
3.4. Поверхность металлов и оксидов металлов (электронные свойства) . . . . .	127
3.5. Поверхность металлов и оксидов металла (магнитные свойства) . . . . .	130
3.6. Поверхностные центры кислотного и основного типа . . . . .	134
3.7. Адсорбция . . . . .	135
3.8. Примеры адсорбции . . . . .	138
3.9. Катализ. Примеры каталитических превращений с участием поверхности твердого тела и нанокластеров . . . . .	145
<b>Глава 4. Термодинамические аспекты поверхности . . . . .</b>	<b>154</b>
4.1. Химический потенциал . . . . .	154
4.2. Свободная энергия Гиббса и свободная энергия Гельмгольца . . . . .	155
4.3. Термодинамика поверхности и поверхностей раздела . . . . .	158
4.4. Термодинамика криволинейной поверхности . . . . .	162
4.5. Структура поверхности и межфазных границ . . . . .	167
4.6. Нуклеация и рост нанокластеров в нанопорах вещества . . . . .	170
4.7. Нуклеация и рост кластеров гидроксида железа в нанопорах (экспериментальное приложение термодинамических параметров) . . . . .	174
4.8. Нуклеация и рост кластеров на основе твердотельных реакций . . . . .	178
4.9. Твердотельная нуклеация и рост кластеров. Пример термического разложения оксалата железа . . . . .	180
<b>Глава 5. Кластерные модели . . . . .</b>	<b>186</b>
5.1. Микроскопическая модель внутрикластерной атомной динамики . . . . .	186
5.2. Термодинамическая модель кластера . . . . .	189

5.3. Квантово-статистическая модель . . . . .	192
5.4. Компьютерные модели кластеров . . . . .	197
5.5. Фрактальные модели кластеров . . . . .	204
5.6. Оболочечные модели кластера . . . . .	208
5.7. Структурная модель кластеров . . . . .	217
<b>Глава 6. Молекулярные лигандные кластеры . . . . .</b>	<b>220</b>
6.1. Молекулярные кластеры металлов . . . . .	220
6.2. Свойства металлических молекулярных кластеров . . . . .	226
6.3. Кластеры на основе оксидов металлов . . . . .	230
6.4. Свойства оксометаллических молекулярных кластеров . . . . .	236
<b>Глава 7. Безлигандные металлические кластеры . . . . .</b>	<b>241</b>
7.1. Кластеры щелочных металлов и серебра . . . . .	242
7.1.1. Ионизация $s^1$ кластеров . . . . .	242
7.1.2. Сродство к электрону . . . . .	245
7.1.3. Стабильность $s^1$ кластеров . . . . .	248
7.1.4. Оптические свойства $s^1$ кластеров . . . . .	254
7.2. Кластеры алюминия . . . . .	259
7.2.1. Энергия ионизации кластеров алюминия . . . . .	259
7.2.2. Поляризуемость кластеров алюминия . . . . .	262
7.2.3. Диссоциация кластеров алюминия . . . . .	263
7.2.4. Реакционная способность кластеров алюминия . . . . .	265
7.3. Кластеры ртути . . . . .	266
7.4. Кластеры переходных металлов . . . . .	270
7.4.1. Энергия ионизации . . . . .	270
7.4.2. Сродство к электрону . . . . .	271
7.4.3. Магнитные свойства кластеров . . . . .	274
7.4.4. Стабильность и диссоциация кластеров . . . . .	277
<b>Глава 8. Углеродные кластеры . . . . .</b>	<b>282</b>
8.1. Малые углеродные кластеры . . . . .	282
8.2. Фуллерены . . . . .	286
8.2.1. Формирование фуллеренов . . . . .	287
8.2.2. Фрагментация фуллеренов . . . . .	289
8.2.3. Энергии ионизации и энергия сродства к электрону . . . . .	290
8.2.4. Эндоэдральные фуллерены . . . . .	292
8.2.5. Экзоэдральные фуллерены . . . . .	294
8.2.6. Фуллерены замещения . . . . .	299
<b>Глава 9. Кластеры инертных газов и малых молекул . . . . .</b>	<b>305</b>
9.1. Кластеры инертных газов . . . . .	305
9.1.1. Нейтральные кластеры инертных газов . . . . .	307
9.1.2. Положительно заряженные кластеры инертных газов . . . . .	312
9.2. Кластеры малых молекул . . . . .	313
9.2.1. Структура кластеров . . . . .	314
9.2.2. Электронно-колебательная структура и спектроскопия . . . . .	316

9.2.3. Фотодиссоциация кластеров . . . . .	320
9.2.4. Кластеры воды . . . . .	322
<b>Глава 10. Кластерные реакции . . . . .</b>	<b>325</b>
10.1. Модель РРК . . . . .	326
10.2. Модель РРКМ и переходное состояние . . . . .	326
10.3. Модель фазового пространства . . . . .	329
10.4. Определение энергий диссоциации с помощью моделей кластерных реакций . . . . .	332
10.5. Реакции рекомбинации . . . . .	333
10.6. Реакции обмена . . . . .	334
10.7. Реакции присоединения . . . . .	335
10.7.1. Реакции присоединения водорода . . . . .	336
10.7.2. Реакции кластеров молибдена с молекулярным азотом . . . . .	341
<b>Глава 11. Коллоидные кластеры и наноструктуры . . . . .</b>	<b>346</b>
11.1. Формирование коллоидных наносистем . . . . .	346
11.1.1. Золи и их формирование . . . . .	346
11.1.2. Мицеллы . . . . .	348
11.1.3. Микроэмульсии . . . . .	350
11.1.4. Формирование кластеров в микроэмульсиях . . . . .	350
11.1.5. Организация и самоорганизация коллоидных структур . . . . .	352
11.2. Оптические и электронные свойства коллоидных кластеров . . . . .	356
11.2.1. Оптические свойства кластеров металлов и плазмонные колебания . . . . .	357
11.2.2. Оптические свойства полупроводниковых кластеров . . . . .	361
11.2.3. Электронная релаксация в коллоидных кластерах . . . . .	363
11.2.4. Одноэлектронный перенос в кластерах . . . . .	365
<b>Глава 12. Фуллериты и углеродные нанотрубки . . . . .</b>	<b>367</b>
12.1. Фуллериты . . . . .	367
12.2. Углеродные нанотрубки . . . . .	371
12.2.1. Структура нанотрубок . . . . .	373
12.2.2. Электронные свойства нанотрубок . . . . .	382
12.2.3. Наноустройства на основе УНТ . . . . .	389
<b>Глава 13. Твердотельные нанокластеры и наноструктуры. Тонкие пленки. Механические и тепловые свойства . . . . .</b>	<b>396</b>
13.1. Формирование твердотельных нанокластеров . . . . .	396
13.1.1. Твердотельные химические реакции . . . . .	397
13.1.2. Механохимические превращения . . . . .	406
13.1.3. Ударно-волновой синтез . . . . .	410
13.1.4. Наноструктурирование под действием давления со сдвигом . . . . .	411
13.1.5. Наноструктурирование путем кристаллизации аморфных структур . . . . .	412
13.1.6. Компактирование (консолидация) нанокластеров . . . . .	414
13.2. Структурные особенности твердотельных наноструктур . . . . .	415

13.2.1. Дефекты и напряжения в наноструктурах . . . . .	415
13.2.2. Структурные фазовые переходы в наноструктурах . . . . .	421
13.3. Механические свойства нанокластеров и наноструктур . . . . .	423
13.4. Тепловые свойства нанокластеров и наноструктур . . . . .	428
13.4.1. Плавление нанокластеров . . . . .	428
13.4.2. Теплоемкость нанокластеров . . . . .	431
13.4.3. Термическое расширение . . . . .	434
13.5. Тонкие пленки . . . . .	435
<b>Глава 14. Матричные и супрамолекулярные нанокластеры и наноструктуры . . . . .</b>	<b>445</b>
14.1. Нанокластеры металлов и оксидов металлов в матрице органических веществ . . . . .	445
14.2. Макромолекулярные и супрамолекулярные наноструктуры . . .	454
14.3. Белки, полинуклеотиды и биологические объекты . . . . .	462
14.4. Внутримолекулярная динамика биополимеров . . . . .	468
<b>Глава 15. Оптические и электронные свойства наносистем и наноматериалов. Оптические наноустройства . . . . .</b>	<b>485</b>
15.1. Оптические свойства наносистем . . . . .	485
15.1.1. Наносистемы на основе металлических нанокластеров . . . . .	486
15.1.2. Наносистемы на основе полупроводниковых кластеров . . . . .	490
15.1.3. Фононные нанокристаллы и пористый кремний . . . . .	494
15.1.4. Полупроводниковые наноструктуры и наноустройства . . . . .	496
15.2. Электропроводимость наноструктур . . . . .	506
15.2.1. Электропроводимость трехмерных, двумерных и одномерных наноструктур . . . . .	507
15.2.2. Электропроводящие устройства . . . . .	513
15.2.3. Интеграции наноструктур в электронные устройства . . . . .	518
<b>Глава 16. Магнитные свойства наноструктур . . . . .</b>	<b>522</b>
16.1. Суперпарамагнетизм . . . . .	523
16.2. Намагниченность и квантовое магнитное туннелирование . . . .	534
16.2.1. Намагниченность нанокластеров и наноструктур . . . . .	535
16.2.2. Квантовое магнитное туннелирование . . . . .	542
16.3. Гигантское магнетосопротивление . . . . .	545
16.4. Магнитные фазовые переходы . . . . .	550
16.4.1. Наносистемы с изолированными кластерами . . . . .	552
16.4.2. Наноструктуры . . . . .	566
<b>Заключение . . . . .</b>	<b>585</b>