

Spis treści

Oznaczenia i skróty	5
Przedmowa	7
Wprowadzenie	9
CZĘŚĆ I METODY PROGRAMU HYPERCHEM I SPOSÓB OBLICZEŃ Z ZASTOSOWANIEM TEGO PROGRAMU	15
1. Metody półempiryczne	17
1.1. Rozszerzona metoda Hückla (ETH – Extended Huckel)	17
1.2. Metoda całkowitego zaniedbania przenikania różniczkowego (CNDO)	17
1.3. Metoda pośredniego zaniedbania przenikania różniczkowego (INDO)	18
1.4. Zmodyfikowana metoda pośredniego zaniedbania przenikania różniczkowego, wersja 3 (MINDO/3)	18
1.5. Zmodyfikowana metoda zaniedbania przenikania dwuatomowego (MNDO)	18
1.6. Metoda modelu Austina (AM 1)	19
1.7. Metoda modelu parametryzowanego (PM 3)	19
1.8. Metoda pośredniego zaniedbania przenikania różniczkowego Zenera 1 (ZINDO/1)	19
1.9. Metoda pośredniego zaniedbania przenikania różniczkowego Zenera S (ZINDO/S)	20
2. Metody <i>ab initio</i>	21
2.1. Unormowane atomowe orbitale Gaussa	21
2.2. Molekularne funkcje Gaussa	22
3. Sposób obliczeń z zastosowaniem programu HyperChem	25
3.1. Cząsteczka toluenu	25
3.1.1. Wyniki obliczeń	26
3.2. Cząsteczka aspiryny	30
3.2.1. Wyniki obliczeń	30
CZĘŚĆ II ARCHITEKTURA SKONDENSOWANYCH STRUKTUR WĘGLA	35
1. Struktura i właściwości grafenu	37
1.1. Obliczenia energetyczne	38
1.2. Wpływ atomów obcych na strukturę nanosiatek grafenowych i energię wiązań	39
2. Struktura i właściwości nanorurek	41
2.1. Obliczenia energetyczne	41
2.2. Zależność średnicy nanorurek od energii wiązań i energii deformacji pierścienia węglowego	44
2.3. Podstawienie atomów obcych w nanorurce	46
2.4. Formy nanorurek	47
2.4.1. Formy nanorurek wypełnionych	49
3. Fulereny C ₆₀	51
3.1. Modelowanie cząstki C ₆₀	51
3.2. Cząstki C ₆₀ z wbudowanymi atomami obcymi	52

3.3. Ocena właściwości fulerenu C ₆₀	53
CZĘŚĆ III MODELOWANIE MOLEKUŁ ZAWIERAJĄCYCH METALE PRZEJŚCIOWE	57
1. Wprowadzenie	59
2. Związki kompleksowe	61
2.1. Struktura elektronowa atomów metali przejściowych	61
2.1.1. Wyniki obliczeń dla metali przejściowych o liczbie atomowej mniejszej od 54 i o liczbie atomowej większej od 54	62
3. Związki kompleksowe metali przejściowych	67
3.1. Wyniki obliczeń	67
4. Kompleksy makrocycliczne	73
4.1. Wyniki obliczeń	74
5. Kompleksy porfiryny z metalami przejściowymi	79
5.1. Wyniki obliczeń	79
CZĘŚĆ IV PROJEKTOWANIE KLASTRÓW	85
1. Wprowadzenie	87
2. Kryształy	89
3. Projektowanie klastra CuSO ₄ · 5H ₂ O	91
4. Procesy powierzchniowe	95
4.1. Adsorpcja azotu i amoniaku na Fe-α	95
4.1.1. Wyniki obliczeń	95
4.2. Energia przesunięć atomu Fe w modelu	97
4.2.1. Adsorpcja atomu azotu	99
4.2.2. Adsorpcja cząsteczki NH ₃ na Fe-α	102
CZĘŚĆ V PROJEKTOWANIE MATERIAŁÓW W 2D	105
1. Wprowadzenie	107
2. Statystyka Fermiego–Diraca	111
3. Ocena projektowanych materiałów	115
3.1. Wytrzymałość mechaniczna	115
3.2. Właściwości elektryczne i potencjał chemiczny	115
4. Wyniki obliczeń	117
4.1. Nanosiatki niezawierające metali	117
4.1.1. Ocena projektowanych nanosiatek	123
4.2. Nanosiatki zawierające metale	126
Podsumowanie	133
Literatura	135
Streszczenie	139
Summary	141