

Наименование НИР: Структура, реакционная способность и химические превращения органической периферии углеродных нанотрубок.		<p style="text-align: center;">Руководитель</p>  <p style="text-align: center;">Базлов Дмитрий Александрович, к.х.н.</p>
Заказчик, программа: Министерство образования и науки РФ, государственное задание на выполнение НИР вузу.		
Номер: 3.4964.2011	Внутренний шифр: ЗН-1062	
Сроки выполнения: 2012г.	Коды ГРНТИ: 31.21.00	
Место выполнения: НОЦ «Физическая органическая химия»		

Аннотация НИР:

Углеродные нанотрубки – один из перспективных классов нанообъектов, которые обладают широким набором ценных свойств и имеют самые разнообразные области применения. Однако отсутствие растворимости и трудности с манипуляцией в любых растворителях накладывают значительные ограничения на использование УНТ. Реакции УНТ с различными классами соединений, в первую очередь с органическими, могут сделать их более "растворимыми" и облегчить интегрирование в неорганические и биологические наноструктуры. В результате, интерес к проблеме функционализации углеродных нанотрубок возрастает.

В ходе выполнения проекта была усовершенствована методология очистки от примесей и функционализации углеродных нанотрубок раствором азотной кислотой в концентрации 30 % под действием температуры 60°C и ультразвука.

Разработана новая методология модификации функционализированных углеродных нанотрубок, главным образом посредством реакций окисления (с образованием в структуре УНТ таких функциональных групп как: гидроксильные, карбоксильные и карбонильные группы), реакций циклоприсоединения (взаимодействие с пара-нитроанилином), реакций взаимодействия с гетероциклическими соединениями, такими как 2,1-бензозоксазолы. Разработана методика модификации гетероциклических соединений заместителями различного рода. Получен ряд образцов функционализированных УНТ, исследовано строение и свойств полученных систем, проведено их квантово-химическое моделирование.

Квантово-химическое моделирование структур УНТ различного диаметра (10-20 Å), процессов их модификации и функционализации осуществлялось с использованием компьютерных программ Firefly 7.0 и Морас 2009. Моделирование проводилось полуэмпирическими методами PM3, RM1 и PM6, а так же результаты были верифицированы методом DFT/B3LYP в базисе 6-31(d,p). Анализ электронного строения одностенных УНТ различного диаметра квантово-химическими методами показал концентрацию отрицательного заряда на крайних атомах углерода, что предопределяет направление ковалентной функционализации. Отмечено влияние карбоксильного и нитробензойного фрагмента на морфологию углеродных нанотрубок различного диаметра. Введение карбоксильной группы и молекулы нитробензола в структуру углеродных нанотрубок приводит к перераспределению зарядовой плотности на атомах углерода в области непосредственного контакта, так и соседних атомах углерода в трубке.

Получены данные по условиям функционализации и модификации УНТ. Отмечены факторы, влияющие на эти процессы. Получена компьютерная модель функционализации УНТ различными заместителями. Получены данные о влиянии заместителей на морфологию УНТ и распределение зарядов на атомах в УНТ. Получен ряд образцов функционализированных УНТ.