

Наименование НИР: Химическая модификация и особенности строения углеродных нанотрубок.		<p style="text-align: center;">Руководитель</p>  <p style="text-align: center;">Орлов Владимир Юрьевич, профессор, д.х.н.</p>
Заказчик, программа: Министерство образования и науки РФ, Тематический план НИР вуза.		
Номер: 1.09.10	Внутренний шифр: ЗН-544	
Сроки выполнения: 2010г.	Коды ГРНТИ: 31.25.17, 31.25.19	
Место выполнения: НОЦ «Физическая органическая химия»		

Аннотация НИР:

Углеродные нанотрубки (УНГ) – один из перспективных классов нанообъектов, которые обладают широким набором ценных свойств и имеют самые разнообразные области применения. Одним из способов управляемой регуляции структуры (а соответственно и тонкого варьирования свойств) является их химическая модификация как за счет создания дополнительных ковалентных связей (формирование на поверхности объекта гетероатомных функциональных групп, например, атомов галогена, карбоксильной группы и др.), так и нековалентных (π - π) взаимодействий. По сравнению с исходными структурами, модифицированные разнообразными функциональными группами углеродные нанотрубки проявляют другие физические и физико-химические свойства, демонстрируют заметную активность в химических процессах при дальнейшем преобразовании внесенных функций. В настоящей работе нами рассмотрены аспекты как ковалентной, так и нековалентной модификации многослойных углеродных нанотрубок.

Исходным этапом модификации нами выбрано окисление до образования карбоксильных групп. Преимуществом этого подхода является введение в структуру достаточно инертного нанообъекта химически высоколабильных фрагментов. Карбоксилизация многостенных углеродных нанотрубок осуществлялась путем взаимодействия последних с различными окислительными агентами (азотная кислота в различных средах, соли хрома, марганца в высших степенях окисления, пероксид водорода). Образование продуктов функционализации подтверждено данными физико-химических методов анализа. Одной из задач работы было введение сравнительно небольшого числа функциональных групп для избежания значительных изменений морфологии трубки, появления большого числа разрывов стенок.

Перспективными реагентами для нековалентной функционализации нанотрубок являются соединения, содержащие конденсированные карбо- и гетероциклические фрагменты, что будет обеспечивать достаточно эффективное π - π взаимодействие, а также формирующие ротаксаноподобные структуры. Было проведено экспериментальное исследование взаимодействия углеродных нанотрубок с 8-оксихинолинолом, что привело к образованию устойчиво связанных продуктов. Проведенные теоретические исследования показывают, что при нековалентном взаимодействии гетероциклического соединения с углеродной нанотрубкой наблюдается заметное изменение зарядов атомов углерода УНГ как в области непосредственного контакта, так и для соседних узлов. Наибольшее отклонение отмечено для углерода, локализованного в районе гетероатома. Заметный заряд наблюдается и на атомах УНГ, расположенных в области карбоциклического фрагмента. Наличие заряда на соседних узлах открывает возможности управляемой селективной химической модификации в мягких условиях.

Результаты НИР представлены на конференциях: III Междун. конф. «Химия гетероциклических соединений», Москва, 2010., Междун. конференция «Углерод. Конструкционные и функциональные материалы и технологии их производства» Владимир 2010.