

Наименование НИР: Компьютерное моделирование и отбор эффективной структуры и динамики органической периферии модифицированных углеродсодержащих нанотрубок.		<p style="text-align: center;">Руководитель</p>  <p style="text-align: center;">Базлов Дмитрий Александрович, ст. преподаватель, к.х.н.</p>
Заказчик, программа: Министерство образования и науки РФ, ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России».		
Номер: 14.В37.21.1630	Внутренний шифр: 919	
Сроки выполнения: 2012-2013	Коды ГРНТИ: 31.21.00	
Место выполнения: НОЦ «Физическая органическая химия»		

Аннотация НИР:

Продукты взаимодействия УНТ с диазосоединениями на основе нитроанилина исследовались в реакции нуклеофильного ароматического замещения водорода карбанионами арилацетонитрилов. Структура сформированной органической периферии УНТ устанавливалась методами колебательной спектроскопии.

Для оценки пространственной структуры периферийных групп использованы методы квантово-химического моделирования. Предварительная оптимизация и оценка энергетических параметров проводилась методом последовательного приближения. Составлен обзор по методам квантово-химического моделирования (методы RM1, PM6) структур углеродных нанотрубок и процессов их модификации.

Отмечена непосредственная связь геометрии углеродных нанотрубок с ее реакционными свойствами. С возрастанием деформации гексагонов в структуре углеродных нанотрубок поверхность нанотрубки становится более доступной для атаки, что приводит к возрастанию ее реакционной способности.

Оценка электронного строения одностенных углеродных нанотрубок различной хиральности и диаметра квантово-химическими методами показал концентрацию отрицательного заряда на крайних атомах углерода, что может предопределять направление ковалентной функционализации. Отмечено преобладание химической активности у нанотрубок хиральностью «armchair».

При различных направлениях окисления одностенных углеродных нанотрубок различного диаметра центры дальнейшей ковалентной модификации по зарядовому фактору локализованы на функциональных группах тем самым открывая возможности проведения направленного химического модифицирования нанотрубок широким спектром заместителей, с получением материалов с принципиально новыми, практически ценными свойствами.

Отмечено влияние нитрофенильного и бензольного фрагментов на морфологию углеродных нанотрубок различного диаметра.

Произведено исследование реакции 1,3-диполярного циклоприсоединения азометиновых илидов к поверхности углеродных нанотрубок методами квантовой химии.

Показано, что при увеличении диаметра углеродной нанотрубки и присоединении структуры заданного типа значение энергетического барьера циклоприсоединения также возрастает, т.е. чем больше диаметр УНТ, тем сложнее идет реакция.

Отмечено, что в процессе циклоприсоединения происходит перераспределение зарядов на атомах C-N-C присоединяемого илида - наблюдается смещение отрицательной электронной плотности с атомов углерода в свободном состоянии на атом азота при присоединении цикла к боковой поверхности нанотрубки.