

**Наименование НИР:** Компьютерное моделирование и отбор эффективной структуры и динамики органической периферии модифицированных углеродсодержащих нанотрубок.

**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:** 2012-2013г.

**Коды ГРНТИ:** 31.21.00

**Место выполнения:** НОЦ «Физическая органическая химия»

**Руководитель**



**Базлов Дмитрий Александрович, к.х.н.**

### **Аннотация НИР:**

Изучение закономерности процессов формирования развитой органической периферии для карбо- и гетероароматических систем и углеродных наноструктур, построение компьютерной модели для молекулярных и надмолекулярных углеродных систем и расширение их многообразия и соответственно свойств изучаемых объектов являются крайне важными задачами в развитии современных подходов в нанотехнологии.

В ходе проекта изучались закономерности процессов формирования развитой органической периферии для карбо- и гетероароматических систем (производных 2,1-бензизоксазолов) и углеродных нанотрубок. В результате этого, строились компьютерные модели для молекулярных и надмолекулярных углеродных систем. На основании компьютерных моделей можно предположить о возможном многообразии свойств изучаемых объектов.

На начальном этапе проводилось квантово-химическое моделирование, структурный анализ и оценка динамики трансформаций супрамолекулярных объектов, что позволило выбрать оригинальные объекты карбо- и гетероароматической природы, периферийные функциональные группы которых могут обеспечить требуемый набор характеристик, включая проявление возможностей связывания с соединениями неорганической и органической природы.

Специфику данного проекта можно отобразить в следующих последовательных стадиях:

Проводилось теоретическое изучение процессов функционализации конденсированных карбо- и гетероароматических систем различной степени сложности. В качестве объекта функционализации и модификации выбраны одностенные и многостенные углеродсодержащие нанотрубки (УНТ) различных диаметров от 10 до 20 Å.

Построены компьютерной модели влияние процессов функционализации углеродсодержащих нанотрубок на их морфологию. К процессам функционализации в первую очередь можно отнести реакции окисления, протекающих с образованием на поверхности УНТ карбоксильных, карбонильных и гидроксильных групп, а так же реакции циклоприсоединения и аминирования.

