

Сведения о ходе выполнения ПНИ
по Соглашению от 21 октября 2014 г. № 14.574.21.0112
по теме «Создание программно-вычислительного комплекса для компьютерного
моделирования структурных, сорбционных и электронных свойств фуллеренов и углеродных
нанотрубок и процессов адсорбции»

Научный руководитель работ д.х.н., проф. Е.В. Бутырская

В ходе выполнения проекта по Соглашению о предоставлении субсидии от 21.10.2014 № 14.574.21.0112 с Минобрнауки России в рамках федеральной целевой программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014-2020 годы» на этапе № 1 в период с 21.10.2014 по 31.12.2014 выполнялись следующие работы:

1.1 Аналитический обзор современной научно-технической, нормативной, методической литературы;

1.2 Проведение патентных исследований;

1.3 Разработка программы расчета координат атомов углерода в углеродных нанотрубках различной структуры;

1.4 Компьютерное моделирование электронного энергетического спектра УНЧ различной структуры;

1.5 Разработка методики ускоренных коррозионных испытаний красок с применением метода импедансной спектроскопии;

1.6 Исследование реакционной способности углеродных нанотрубок различных производителей к образованию гибридных бионаноструктур глюкоамилаза-УНТ-SiO₂-Si и выбор наиболее реакционноспособных УНЧ;

1.7 Закупка оборудования и материалов для проведения ПНИ. Подготовка отчетной документации по этапу;

1.8 Аналитический обзор современной научно-технической, нормативной, методической литературы по лакокрасочным материалам;

1.9 Разработка начальных рецептур (без УНЧ), разработка методики получения краски и наработка экспериментальных образцов эпоксидных лакокрасочных материалов на основе смолы Э-40.

При этом были получены следующие результаты:

Проведен аналитический обзор современной научно-технической, нормативной, методической литературы. Проведены патентные исследования. Разработана программа расчета координат атомов углерода в углеродных нанотрубках различной структуры. Выполнено компьютерное моделирование электронного энергетического спектра углеродных наночастиц (УНЧ) различной структуры. Разработана методика ускоренных коррозионных испытаний красок с применением метода импедансной спектроскопии. Исследована реакционная способность углеродных нанотрубок различных производителей к образованию гибридных бионаноструктур глюкоамилаза-УНТ-SiO₂-Si и выбраны наиболее реакционноспособные УНЧ. Проведена закупка оборудования и материалов для проведения ПНИ; подготовлена отчетная документация по этапу. За счет внебюджетных средств, предоставленных промышленным партнером (ООО ПК «Техпромсинтез»), проведен аналитический обзор современной научно-технической, нормативной, методической литературы по лакокрасочным материалам; разработаны начальные рецептуры (без УНЧ) лакокрасочных материалов; разработана методика получения и наработаны экспериментальные образцы эпоксидных лакокрасочных материалов на основе смолы Э-40.

Разработанный программный модуль ПВК – программа расчета координат атомов углерода в углеродных нанотрубках при заданных геометрических характеристиках сворачиваемого в нанотрубку графенового листа обеспечивает точность расчета координат атомов не менее 10⁻⁴ ангстрем.

Построенные модели электронного энергетического спектра УНТ выявили, во-первых, осциллирующий характер ширины запрещенной зоны как функции диаметра для бесконечных зигзагообразных трубок; во-вторых, металлический тип проводимости для бесконечных УНТ малого диаметра с хиральностями «зигзаг» (0,4) и (0,5), в третьих, полупроводниковый тип проводимости для кресельных ультракоротких УНТ с хиральностью (5,5), в-четвертых, длины 4.7 и 8.0 нм ультракоротких одностенных УНТ (5, 5), при которых ширина запрещенной зоны равна таковой для бесконечной нанотрубки (30 мэВ).

Разработанная методика ускоренных антикоррозионных испытаний для эпоксидного лака методом спектроскопии электрохимического импеданса показала, что достаточное время для проведения испытания одного образца составляет 12 суток.

Показано, что для получения гибридных бионаноструктур глюкоамилаза-УНТ-SiO₂-Si наиболее эффективными являются короткие (с длиной менее 5 нм) УНТ.

Оценка элементов новизны научных и технологических решений:

- новизна алгоритма программы расчета координат атомов углерода в углеродной нанотрубке заключается в оптимизации алгоритма введением специально определенной нумерации атомов. Каждый атом характеризуется тройкой чисел (x, y, i) , $i=0, 1$ единственным образом. Это позволяет пропустить шаг работы алгоритма по определению принадлежности атома шестиугольнику и значительно упростить шаг построения связей между атомами.

- новизна алгоритма визуализации сложных кластерных структур и их физико-химических характеристик с использованием графического процессора заключается в особом способе визуализации исходных данных пространственно распределенной функции $f(x, y, z)$ – путем построения трехмерного объекта при условии динамического изменения угла обзора и масштаба на основе выборки данных по плоскости, сфере или цилиндру. Для алгоритма построения эквипотенциальной поверхности новизна заключается в создании нескольких эквипотенциальных поверхностей за одну итерацию алгоритма, что значительно ускоряет его работу при построении эквипотенциальных поверхностей вида $f(x, y, z) = \pm C$.

- установлено, что бесконечные одностенные углеродные нанотрубки малого диаметра (0,4) и (0,5) не подчиняются традиционному правилу проводимости;

- установлен осциллирующий характер ширины запрещенной зоны как функции диаметра нанотрубки для бесконечных зигзагообразных трубок в интервале диаметров 0,8 -2,0 нм;

- введено правило классификации по проводимости для изомера зигзагообразных фторированных трубок стехиометрии C₂F: одностенные трубки с четными индексами хиральности являются металлическими (за исключением (0,4)), а с нечетными – полупроводниками;

- предложен способ корректировки работы выхода электронов по усредненным экспериментальным значениям потенциала ионизации и сродства к электрону, позволяющий достичь близкие значения работы выхода электронов, независимо от используемого метода расчета для ультракоротких нанотрубок (5,5) и (0,9) с относительным отклонением не более 2%.

- показано, что для получения гибридных бионаноструктур глюкоамилаза-УНТ-SiO₂-Si наиболее эффективными являются короткие углеродные нанотрубки.

Этап № 1 выполнен надлежащим образом, в соответствии с техническим заданием на выполнение ПНИ. Разработанная отчетная документация представлена согласно утверждённым Минобрнауки России «Методическим указаниям по оформлению отчётной документации».

Отчет и отчетная документация выставлены на сайт <https://sstp.ru>.