

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 № 2 в период с 01.01.2015 по 30.06.2015 выполнялись следующие работы:

1.1. Квантово-химическое моделирование и оптимизация структуры фуллеренов и углеродных нанотрубок различной геометрии с использованием различных квантово-химических моделей.

1.2. Компьютерное моделирование электронного энергетического спектра УНЧ различной структуры в электрическом поле.

1.3. Разработка методики допирования углеродными нанотрубками полимеров, на примере эпоксидных лакокрасочных материалов на основе смол Э-40, ЭД-41.

1.4. Разработка рецептур и изготовление экспериментальных образцов эпоксидных лакокрасочных материалов на основе смол Э-40, ЭД-41 с углеродными нанотрубками.

1.5. Подготовка отчетной документации по этапу.

1.6. Исследования свойств экспериментальных образцов лакокрасочных материалов на основе эпоксидных смол Э-40, ЭД-41 без и с добавлением углеродных нанотрубок.

При этом были получены следующие результаты:

- аналитический обзор современной научно-технической, нормативной, методической литературы и анализ патентных исследований по разрабатываемой теме;
- программа расчета координат атомов углерода в углеродных нанотрубках различной структуры;

- модели структуры электронного энергетического спектра немодифицированных и фторированных углеродных нанотрубок различной структуры и размерные эффекты в фундаментальных параметрах УНТ;

- модели структуры фуллеренов C_{60} , C_{70} , C_{80} , C_{90} , C_{78} , C_{96} и углеродных нанотрубок хиральностей (4,4), (5,5), (6,6) различной длины, установленные компьютерным моделированием методами mm3, am1, pm3, lsda/3-21g*, b3lyp/6-31g; закономерности изменения структуры УНЧ, электрических и термодинамических свойств УНТ при изменении их размеров и зависимость от метода расчета;

- модели электронного энергетического спектра фуллеренов C_{60} , C_{70} , C_{80} , C_{90} , C_{78} , C_{96} и углеродных нанотрубок хиральностей (5,5) и (0,9) различной длины в электрическом поле, полученные в результате компьютерного моделирования; закономерности изменения электронного энергетического спектра и фундаментальных параметров УНЧ при изменении напряженности внешнего электрического поля и размеров УНЧ;

- рецептуры лакокрасочных материалов без и с углеродными нанотрубками, методика их получения и экспериментальные образцы эпоксидных лакокрасочных материалов на основе смол Э-40 и ЭД-41;

- результаты исследования свойств экспериментальных образцов лакокрасочных материалов на основе эпоксидных смол Э-40, ЭД-41 без и с добавлением углеродных нанотрубок.

Оценка элементов новизны научных (технологических) решений, применявших методик и решений:

- новизна алгоритма программы расчета координат атомов углерода в углеродной нанотрубке заключается в оптимизации алгоритма во введении специальной нумерации атомов;
- научная новизна результатов расчета характеристик УНТ заключается в выявлении закономерностей изменения свойств УНТ от их структуры, установлении закономерностей зависимости результатов расчета от выбора расчетной модели, установлении закономерностей изменения электронного энергетического спектра и фундаментальных параметров УНТ с изменением напряженности внешнего электрического поля, разработке методики и получении экспериментальных образцов новых лакокрасочных материалов с УНТ.

Охраноспособные результаты интеллектуальной деятельности на втором этапе отсутствуют.

Этап № 2 выполнен надлежащим образом, в соответствии с техническим заданием на выполнение ПНИ. Разработанная отчетная документация представлена согласно утверждённому Минобрнауки России «Методическим указаниям по оформлению отчётной документации».

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