


Наименование НИР: Теоретические основы функционализации и лигирования молекулярных и надмолекулярных объектов по углеродным центрам.		<p style="text-align: center;">Руководитель</p>  <p style="text-align: center;">Базлов Дмитрий Александрович, к.х.н.</p>
Заказчик, программа: Министерство образования и науки РФ, Тематический план НИР вуза.		
Номер: 1.08.11	Внутренний шифр: ЗН-1008	
Сроки выполнения: 2011г.	Коды ГРНТИ: 31.25.17, 31.25.18	
Место выполнения: НОЦ «Физическая органическая химия»		

Аннотация НИР:

Одним из способов тонкой регулировки структуры углеродных нанотрубок (а соответственно и тонкое варьирование свойств) является их химическая модификация как за счет создания дополнительных ковалентных связей. По сравнению с исходными структурами, ковалентно модифицированные трубки проявляют другие физические и физико-химические свойства, демонстрируют заметную активность в химических процессах при дальнейшем преобразовании внесенных функций. При этом за счет варьирования структуры групп возможно мягкое изменение свойств. Нековалентное взаимодействие, кроме вышеуказанного, позволяет более эффективно проявлять нанообъектам структуроорганизующие свойства, например, для полимерных и биологических макромолекул. Существенной проблемой химической функционализации является то, что углеродные нанотрубки весьма химически инертны и первичное введение функциональных групп происходит в достаточно жестких условиях с использованием крайне активных реагентов. При этом условия проведения процессов весьма далеки от оптимальных, вопросы же направления функционализации обсуждаются крайне редко и носят в основном констатирующий характер. Нами разработана модель функционализации углеродных нанотрубок. В процессе окисления углеродсодержащих нанотрубок азотной кислотой реализовано введение в поверхность углеродсодержащих нанотрубок карбоксильной, а также сопутствующих им карбонильной и гидроксильной групп. В месте с этим происходит очищение нанотрубок от разного рода примесей, аморфный углерод окисляется до углекислого газа, частицы медного и никелевого катализатора- до растворимых солей металлов. Таким образом, решаются сразу обе задачи - как очистка от примесей, так и солубилизация нанотрубок. Степень функционализации нанотрубок регулируется. Кроме того, осуществлено введение исключительно гидроксильных групп. На их основе получены устойчивые нанодисперсии и достигнута значительная дезинтеграция ассоциатов углеродных нанотрубок. Проведено квантово-химическое моделирование структур углеродсодержащих нанотрубок, процессов их модификации и функционализации. Для этого использовались компьютерные программы Firefly 7.0 и Морас 2009. Моделирование проводилось полуэмпирическими методами RM1 и PM6, а так же результаты были верифицированы методом DFT/B3LYP в базисе 6-31(d,p). Проведен анализ моделирования процесса нековалентной модификации, взаимодействия 8-оксихинолина с поверхностью нанотрубок. Наблюдается заметное изменение зарядов атомов углерода как в области непосредственного контакта, так и для соседних узлов. Наибольшее отклонение отмечено для углерода, локализованного в районе гетероатома. Проведена оценка свойств систем, лигированные металлами Ni²⁺, Cu²⁺, Fe³⁺, Co²⁺.

Результаты НИР представлены на конференциях: Международная конференция “Current Topics in Organic Chemistry” (СТОС-2011) (Новосибирск) - июль 2011г., 64-й региональная научно-техническая конференция студентов, магистрантов и аспирантов ВУЗов (Ярославль) – май 2011г., XIV Молодежная конференция по органической химии (Екатеринбург) - июнь 2011г.