

Резюме проекта, выполняемого в рамках ФЦП

«Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014 – 2020 годы»

по этапу № 4

Номер Соглашения о предоставлении субсидии: 14.613.21.0010

Тема: «Развитие теории образования и разработка эффективного метода синтеза эндоэдральных металлофуллеренов, исследование их свойств и возможностей применения»

Приоритетное направление: Энергоэффективность, энергосбережение, ядерная энергетика; Транспортные и космические системы; Науки о жизни; Индустрия наносистем; Рациональное природопользование; Информационно-телекоммуникационные системы

Критическая технология: Технологии получения и обработки функциональных наноматериалов

Период выполнения: 27.08.2014 - 31.12.2016

Плановое финансирование проекта: 52.40 млн. руб.:

Бюджетные средства 26.20 млн. руб.,

Внебюджетные средства 26.20 млн. руб.

Получатель: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук

Иностраный партнер: Graduate School of Science, Division of Material Science, Department of Chemistry, Nagoya University

Ключевые слова: углеродные кластеры, фуллерены, эндоэдральные металлофуллерены, плазмо-химический синтез, сборка наноструктур

1. Цель проекта

Разработка эффективного дугового плазменно-химического метода синтеза эндоэдральных металлофуллеренов на основе теоретических и экспериментальных исследований, их получение и исследование оптических, электронных и магнитных свойств для целей электроники, оптики и спинтроники

2. Основные результаты проекта

Экстрагированы органическими растворителями из углеродного конденсата и предварительно выделены с помощью аналитической хроматографии индивидуальные эндофуллерены (карбидные $Ti_2C_2@C_{78}$, $Y_2C_2@C_{82}$, нитридные $Sc_3N@C_{2n}$ ($n=42-49$)). Выделены HPLC методом из полученных экстрактов индивидуальные эндофуллерены (карбидные $Ti_2C_2@C_{78}$, $Y_2C_2@C_{82}$, нитридные $Sc_3N@C_{2n}$ ($n=42-49$)). Исследованы основные свойства выделенных индивидуальных эндоэдральных металлофуллеренов (карбидные $Ti_2C_2@C_{78}$, $Y_2C_2@C_{82}$, нитридные $Sc_3N@C_{2n}$ ($n=42-49$)). Выполнено теоретическое исследование методом функционала плотности (DFT) электронных, магнитных, сегнетоэлектрических и оптических свойств твердой фазы эндоэдральных металлофуллеренов (одноатомные: $M@C_{82}$ ($M=Sc, Y,$

La, Gd); Ca@C_n (n=72,74,82,84,94); двухатомные: Ce₂@C₈₀, Er₂@C₈₀, Sc₂@C₈₄; карбидные Ti₂C₂@C₇₈, Y₂C₂@C₈₂, нитридные Sc₃N@C_{2n} (n=42-49)).

3. Охраноспособные результаты интеллектуальной деятельности (РИД), полученные в рамках прикладного научного исследования и экспериментальной разработки

Изобретение, Патент №2582697 от 06.04.2016 "Способ синтеза эндоэдральных фуллеренов", РФ

4. Назначение и область применения результатов проекта

Достигнутые результаты могут быть использованы в лабораториях и организациях, занимающихся производством, исследованием свойств и практическими применениями ЭМФ. Способность ЭМФ включать атомы металлов с интересными оптическими, магнитными и радиоактивными свойствами делает их потенциальными кандидатами для применений в различных областях, таких как фотогальванические устройства, элементы нанoeлектроники и оптоэлектроники, в биомедицинской инженерии и т.д. ЭМФ являются перспективными материалами с рядом потенциальных интересных приложений, связанных с магнетизмом, сверхпроводимостью и нелинейными оптическими свойствами. Поскольку для ЭМФ разница в энергии между HOMO и LUMO зависит от состава внутреннего кластера, размера и симметрии углеродной клетки, а также от наличия внешних функциональных групп, ширина запрещенной зоны может быть точно настроена путем изменения металлического кластера для различных потенциальных приложений в оптике и нанoeлектронике. Явления фотоиндуцированного переноса заряда при использовании эндоэдральных фуллеренов в качестве акцептора электронов в электронных донорно-акцепторных диадах (совместно с молекулами-донорами порфиринов, фталоцианинов, их производных и др.) даёт возможность создания перспективных фотоэлектрических материалов, которые будут использоваться в фотовольтаических системах преобразования солнечной энергии.

Некоторые эндоэдральные фуллерены с большим временем жизни спиновых состояний могут в будущем использоваться в квантовых вычислениях или устройствах спинтроники. Относительная инертность углеродной структуры ЭМФ делает эти соединения идеально подходящими для медицинских применений. ЭМФ могут применяться, например, в качестве носителя атомов радиоактивных изотопов для использования в ядерной медицине, в качестве радиоактивной метки или как эффективного контрастного вещества для магнитно-резонансной томографии.

5. Эффекты от внедрения результатов проекта

Эффект от внедрения результатов проекта на данном этапе отсутствуют

6. Формы и объемы коммерциализации результатов проекта

Формы и объемы коммерциализации результатов проекта на данном этапе отсутствуют

7. Наличие соисполнителей

Данный проект выполнялся без привлечения соисполнителей.

Комиссия Минобрнауки России признала обязательства по Соглашению на отчетном этапе исполненными надлежащим образом.