**Анкета**

1. **Номер государственного контракта:** № П892
2. **Дата заключения контракта и дата окончания работа:** 18 августа 2009 г. – 31 августа 2011 г.
3. **Руководитель работ:** профессор кафедры теоретической физики и волновых процессов, д.ф.-м.н., профессор Лебедев Николай Геннадьевич.
4. **Цели и задачи.**

Цели: Теоретическое исследование особенностей электронно-энергетических характеристик и физико-химических (адсорбционных, проводящих, нелинейных) свойств углеродных наночастиц (нанотрубок, графена, графана) и композитов на их основе и привлечение молодых специалистов и студентов к выполнению научно-исследовательских работ, связанных с теоретическим изучением свойств новых перспективных материалов на основе углерода.

Задачи: 1. Построение микроскопических моделей углеродных нанотрубок, теоретическое изучение физико-химических свойств углеродных нанотрубок на основе разработанных моделей, проведение квантово-химических расчетов электронного строения углеродных нанотрубок с адсорбированными атомами и молекулами, соединений углеродных и неуглеродных нанотрубок, углеродных нанотрубок и фуллеренов. 2. На основе разработанных моделей теоретическое изучение физико-химических свойств (адсорбционных, проводящих, оптических) углеродных наночастиц (нанотрубок и графена) и особенностей эволюции электромагнитного импульса в массиве углеродных наноструктур. 3. Квантово-химический расчет электронного строения композитных структур, разработка физических основ повышения эффективности сенсоров и устройств управления электромагнитными импульсами на основе углеродных наночастиц. 4. Разработка специальных курсов для программ подготовки бакалавров и магистров, включающих результаты научной работы, полученные в рамках данного проекта (теория конденсированного состояния, методы квантовой химии).

1. **Аннотированная справка о полученных результатах.**

Разработанные микроскопические модели применены для изучения физико-химических свойств углеродных наночастиц (нанотрубок, графен, графан). Рассчитаны одночастичные электронные спектры углеродных нанотрубок и зонная структура графана. Исследовано изменение зонной структуры углеродных нанотрубок, обусловленное деформацией (пьезорезистивный эффект). Изучено изменение проводящих свойств двухслойного графена, обусловленное изменением взаимной ориентации слоев. Исследовано влияние внешнего электрического поля на зонную структуру графеновой наноленты. Рассчитана проводимость двухслойной графеновой наноленты с учетом внешнего электрического поля. Найдены коэффициенты диффузии и проводимости полупроводниковых углеродных нанотрубок во внешнем электрическом поле, транспортные коэффициенты двухслойной графеновой ленты. Исследованы особенности РККИ взаимодействия в примесном биграфене, в квантовых точках бислоя графена, в примесных графеновых лентах. Осуществлен квантово-химический расчет геометрической структуры и электронного строения композитных углеродных наночастиц (нанопочек). Разработаны физические основы повышения эффективности химических и биохимических сенсоров на основе углеродных нанотрубок на основе анализа результатов квантово-химических расчетов электронного строения углеродных нанотрубок с адсорбированными атомами и простыми молекулами. Разработаны физические основы устройств управления электромагнитными импульсами на основе углеродных наночастиц.

Разработаны специальные курсы для программ подготовки бакалавров и магистров: химическая физика, методы квантовой химии, физика конденсированного состояния вещества, теория конденсированного состояния вещества, физика полупроводников и диэлектриков, физика неупорядоченных структур, физика низкоразмерных структур.

Результаты научной работы в рамках данного проекта опубликованы в 16 статьях в ведущих российских и зарубежных журналах. Подготовлено 13 статей к публикации в ведущих российских и зарубежных журналах.

Подготовлены к защите 3 кандидатские диссертации.