

ФОРМА "5Т". ТИТУЛЬНАЯ СТРАНИЦА ОТЧЕТА В РФФИ*(представляется только в печатном виде)*

НАЗВАНИЕ ПРОЕКТА Моделирование диссоциативной хемосорбции водорода в каталитических системах	НОМЕР ПРОЕКТА 15-38-50757
ОБЛАСТЬ ЗНАНИЯ (цифровой код) 08	КОД КЛАССИФИКАТОРА 08-204, 03-510, 03-460
КОД И НАЗВАНИЕ КОНКУРСА мол_нр- Конкурс научных проектов, выполняемых молодыми учеными под руководством кандидатов и докторов наук в научных организациях Российской Федерации	
ФАМИЛИЯ, ИМЯ, ОТЧЕСТВО РУКОВОДИТЕЛЯ ПРОЕКТА Маркелов Денис Анатольевич	ТЕЛЕФОН РУКОВОДИТЕЛЯ ПРОЕКТА +79516605635
ПОЛНОЕ НАЗВАНИЕ ОРГАНИЗАЦИИ, предоставляющей условия для выполнения работ по Проекту физическим лицам: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет»	
ПОДПИСЬ РУКОВОДИТЕЛЯ ПРОЕКТА 	ДАТА

В соответствии с пунктами заявки гранта РФФИ № 15-38-50757-мол_нр были получены следующие результаты:

- 1) Был выбран уточняющий метод в рамках построения кластера по методу Александровича. Показано, что для небольшой молекулы, которой является молекула молекулярного водорода, вполне достаточно использовать нанокластер, состоящей из одной элементарной ячейки – треугольника.
- 2) Были определены основные характеристики квантово-химического метода моделирования, основанные на функционале плотности с использованием гибридного функционала Бекке-Ли-Янга-Парра, которые применялись при расчётах переходных состояний, а также при формировании самосогласующегося уравнения поля и процедур его решения. В качестве базиса для расчёта использовался LANL2DZ базис с псевдопотенциалом.
- 3) Было проведено математическое моделирование и расчет влияния поверхностей металлов Ba, Cd, Ca, Cu, Cs, Ti, Ni, Pd, W и Pt на диссоциативную хемосорбцию водорода.
- 4) Было проведено квантово-химическое моделирование и определены основные параметры кристаллических решеток для поверхностей металлов (Ba, Cd, Ca, Cu, Cs, Ti, Ni, Pd, W и Pt в присутствии водорода. Показано, что наименьшее удлинение связи водород-водород наблюдается для поверхности Ba, Cd, Ca, Cu и Cs, а при переходе к Ni, Pd, W, Ti и Pt эта величина становится на порядок выше.
- 5) Был проведен анализ полученных данных и рассмотрено квантово-химическое моделирование разложения тетрахлорида кремния, которое может происходить по нескольким механизмам. Моделирование взаимодействия тетрахлорида кремния с поверхностью никеля показало, что присутствие никеля ускоряет разложение тетрахлорида кремния до дихлорсилелена и атомов хлора.
- 6) В рамках выполнения работы доцент Воротынцев А.В. был обучен работе на газохроматографическом комплексе «Цвет-Аналитик» с вакуумной системой напуска пробы для анализа хлоридов кремния и хромато-масс-спектрометрическом комплексе Shimadzu GCMS-QP2010Plus.
- 7) Был подготовлен отчет о проведенной работе и публикация (Кадомцева А.В., Воротынцев А.В., Воротынцев В.М. *Гидрирование тетрахлорида германия в присутствии катализатора на основе многостенных углеродных нанотрубок, модифицированных наночастицами меди*. XV Всероссийская конференция VIII Школа молодых ученых Высокочистые вещества и материалы. Получение, анализ, применение. **2015**. С. 40).