

Группа численного исследования нанообъектов и наноструктурированных систем

Руководитель научной группы

Руководитель группы — Вознесенский Михаил Андреевич, к.ф.-м.н. доцент, руководитель ОП магистратуры СПбГУ «Цифровые технологии в химии» по направлению прикладная информатика, офис **2124**

e-mail: m.voznesenskiy@spbu.ru, телефон: 7 (812) 363-60-00 доб. 9804

WoSResearcherIDC-7411-2013, Scopus Author ID: 35231493100

Направление исследований

Расчеты электронного строения твердого тела

Решаемые задачи:

Определение положения кислородных вакансий и допантов в кристаллической структуре полупроводников и диэлектриков

Расчет зонной структуры и плотности состояний полупроводников и диэлектриков

Применение результатов:

Определение концентраций тушения люминесценции

Оценка возможной фотокаталитической активности материалов

Разработка рекомендаций по направленному изменению энергетических спектров наночастиц.

Расчеты магнитных свойств наночастиц

Решаемые задачи:

Моделирование кривых ZFC-FC суперпарамагнитных наночастиц

Определение параметров нанообъектов, оказывающих выраженное влияние на магнитные свойства

Применение результатов:

Описание и предсказание результатов реальных экспериментов

Разработка рекомендаций по составу и параметрам компонентов в материалах сложного строения

Моделирование процессов роста наночастиц

Решаемые задачи:

Установление параметров, управляющих процессом формирования наночастиц в различных условиях

Разработка подходов к описанию процессов формирования наночастиц и к предсказанию формы и размера продуктов синтеза

Применение результатов:

Определение параметров синтеза для получения полупроводниковых и диэлектрических наночастиц с заданными размерами и формой

Изучение взаимодействия поверхности наночастиц с молекулами различной природы

Решаемые задачи:

Разработка расчетной процедуры, обеспечивающей быстрое и максимально корректное определение энергий взаимодействия

Описание взаимодействий компонентов реакционной среды с формирующимися наночастицами

Предсказание активности нанообъектов при взаимодействии с молекулами различной природы

Применение результатов:

Скриннинг исходных реагентов для регулирования параметров наночастиц

Скриннинг сорбентов различной природы для выявления материалов с оптимальными характеристиками для выделения конкретных аналитов

Оценка антибактериальной активности фотокатализаторов

Предсказание распределения неорганического компонента в объеме гибридных материалов

Разработка рекомендаций по направленному изменению формы наночастиц для усиления фотокаталитической активности

Изучение свойств полимерных систем и полимерных композитов

Решаемые задачи:

Разработка крупнозернистых моделей для сокращённого описания свойств полимерных систем

Численное исследование динамических свойств полимерных растворов

Моделирование поведения полимерно-неорганических композитов

Применение результатов:

Предсказание структуры полимерных систем для получения заданных свойств.

=====

Часть исследований проводится совместно с группой синтеза и исследования наночастиц и наноструктурированных материалов. Дополнительную информацию можно найти на сайте nanolabspb.ru

Научные проекты

грант РФФИ 20-03-00762 Разработка подходов к компьютерному моделированию процессов роста наночастиц из растворов: теоретическое и экспериментальное исследование на примере диоксида олова — материала с фотокаталитической активностью.

Проект направлен на решение фундаментальной задачи — построения описания процессов роста наночастиц и выявление основных факторов, влияющих на их размер и морфологию. В задачи проекта входит проведение химических экспериментов по получению гидротермальным методом наночастиц диоксида олова; характеристика полученных частиц (размер, форма, строение), исследования их оптических и фотокаталитических свойств; установление взаимосвязи между свойствами частиц и условиями синтеза; развитие методов стохастического описания процессов роста наночастиц по механизму ориентационного присоединения; разработка моделей, описывающих взаимодействие наночастиц в растворе; моделирование процессов роста наночастиц при условиях, выбранных для химических экспериментов; сравнение результатов численного и химического экспериментов; верификация разработанных моделей. Актуальность проекта связана с разработкой подходов к предсказанию условий синтеза, необходимых для

получения наночастиц с заданными свойствами и с исследованием процессов синтеза наночастиц, обладающих фотокаталитической активностью, которые могут быть использованы для разложения циклических органических соединений при очистке сточных вод.

Грант РФФИ 23-23-00408 Направленное конструирование высокоэффективных фотокатализаторов на основе диоксида олова для очистки сточных вод путем управления процессами ориентационного присоединения.

Проект направлен на разработку подхода к синтезу высокоэффективных фотокатализаторов на основе наночастиц диоксида олова, в частности для очистки сточных вод от различных органических загрязнителей. Для синтеза наночастиц в гидротермальных условиях будет инициирован процесс ориентированного присоединения первичных блоков с различными структурными параметрами и составом поверхности, полученных методом осаждения. В результате будут получены наночастицы, отличающиеся своими морфологическими и структурными параметрами, обладающие различным количеством дефектов, в том числе кислородных вакансий, и, как следствие, обладающие различной фотокаталитической активностью. Полученные наночастицы будут охарактеризованы широким набором физико-химических методов, будут проведены исследования их фотокаталитической активности для разложения органических красителей и антибиотиков. Научная проблема, на решение которой направлен представляемый проект связана с выяснением ключевых особенностей процесса ориентированного присоединения, разработкой алгоритмов получения наночастиц с заданными морфологическими и структурными свойствами и в выявлении связи фотокаталитической активности наночастиц против загрязнителей различной природы с особенностями их строения. Актуальность проекта связана с необходимостью создания отечественных систем эффективной очистки сточных вод от органических соединений, таких как красители и антибиотики. Научная новизна предлагаемого проекта заключается в возможности регулирования параметров, в том числе количество дефектов и кислородных вакансий, наночастиц диоксида олова в ходе их роста по механизму ориентированного присоединения, а также в тщательном изучении взаимосвязи между параметрами и свойствами наночастиц, что позволит с новой точки зрения взглянуть на уже существующие наноматериалы и откроет возможности улучшения их свойств.

Информация для студентов

Группа приглашает студентов для выполнения курсовых работ по физической химии, а также бакалаврских и магистерских диссертаций.

В химии существует много интересных задач, связанных с численными методами и программированием. Компьютерное моделирование давно считается надёжным инструментом для исследования, а компьютерные расчеты стали неотъемлемой частью научной работы.

В зависимости от области ваших научных интересов вы можете научиться проводить квантово-химические расчёты твердых тел, программировать на C++ и/или Python, реализовывать на языке программирования методы и алгоритмы моделирования физико-химических процессов, исследовать кинетику процессов фотокатализа и адсорбции, изучать процессы формирования и разрушения эмульсий Пикеринга.