

СПбГУ

ПРОТОКОЛ
заседания научной комиссии в области прикладной математики

01.03.2022

№ 11/7/17-02-5

Председательствующий – А.О. Бочкарев, доцент

Секретарь – Е.А. Цыганкова, ведущий специалист

Присутствовали:

Профессор
Профессор
Профессор
Доцент
Доцент
Доцент
Профессор

М.Э. Аббасов
М.А. Греков
Е.В. Громова
А.В. Егоров
Г.В. Кривовичев
А.В. Кривошеин
Д.А. Овсянников

Повестка дня:

О рассмотрении заявки профессора Н.В. Егорова в ЕОТП на проект НИОКР, выполняемой из средств портфеля «Научные проекты» Госкорпорации «Росатом».

О рассмотрении заявки профессора Н.В. Егорова в ЕОТП на проект НИОКР, выполняемой из средств портфеля «Научные проекты» Госкорпорации «Росатом».

В научную комиссию предоставлены материалы заявки Егорова Николая Васильевича, профессора кафедры моделирования электромеханических и компьютерных систем, на выполнение НИОКР «Моделирование процесса насыщения водородом углеродных наноконтейнеров в технологиях водородной энергетики».

1) Актуальность заявленной темы.

Проект направлен на решение актуальной проблемы развития нанотехнологий и моделирования структуры наносителем (наноконтейнеров) с использованием современных высокопроизводительных вычислений. Для учета всех видов взаимодействия между частицами на наноуровне необходимо создать физико-математическую модель, основанную на расчетах методами квантовой механики.

2) Научная новизна.

Привлекательность водорода как универсального энергоносителя определяется экологической чистотой, гибкостью и эффективностью процессов преобразования энергии с его участием. Однако низкая плотность газообразного водорода, низкая температура его ожижения, а также высокая взрывоопасность в сочетании с негативным воздействи-

ем на свойства конструкционных материалов ставят на первый план проблемы разработки экономически и технически эффективных и безопасных систем хранения водорода. Данная область исследования относится к одной из наиболее приоритетных в мировой фундаментальной науке. Для количественной оценки характеристик наноструктур необходимо использовать математический аппарат квантовой механики, статистической физики и численные методы, что требует применения мощной современной вычислительной техники. В рамках проекта будут разработаны модели взаимодействия с наполнителем углеродных наноструктур (наноконтейнеров), которые можно применять для транспортировки и хранения сжатого водорода. Предполагается исследовать эндокомплексы сложных полициклических нанокластеров углерода и их гетероциклических аналогов с замещением атомов углерода изоэлектронными парами атомов бора и азота. С помощью компьютерного моделирования предполагается разработать оптимальные наноструктуры и схемы их заполнения водородом в технологических процессах водородной энергетики.

3) *Техническая реализуемость проекта.*

Научная группа профессора Н.В. Егорова обладает всеми необходимыми компетенциями в области моделирования структуры наносистем с использованием современных высокопроизводительных вычислений.

Все исследования, в рамках заявленного проекта, будут проведены на высококлассном оборудовании Ресурсных центров Научного парка Санкт-Петербургского государственного университета (<http://researchpark.spbu.ru>). Научная группа профессора Н.В. Егорова имеет доступ ко всем передовым научным изданиям, необходимым для решения задач проекта.

4) *Продолжительность выполнения проекта: 2 года*

Постановили: по итогам голосования (за – 8, против – нет, воздержались – нет), рекомендовать заявку профессора Н.В. Егорова на выполнение НИОКР «Моделирование процесса насыщения водородом углеродных наноконтейнеров в технологиях водородной энергетики» для участия в конкурсном отборе заявок в ЕОТП на проект НИОКР, выполняемый из средств портфеля «Научные проекты» Госкорпорации «Росатом».

Председатель научной комиссии



А.О. Бочкарев

Секретарь научной комиссии



Е.А. Цыганкова