

МОДЕЛИРОВАНИЕ АДсорбЦИОННЫХ СВОЙСТВ ДЕФЕКТНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР

студентка гр. 103711 Матусевич Т.И.

Научный руководитель – к.ф.-м.н. доцент В.В.Баркалин

Белорусский национальный технический университет

Минск, Республика Беларусь

Углеродные наноструктуры обладают уникальными адсорбционными свойствами, которые обусловлены упорядоченной структурой их нанофрагментов. В ходе данной работы проводилось сравнение сорбционных свойств отдельных молекул и дефектных углеродных наноструктур. Для этого использовались следующие углеродные наноструктуры:

- графеновый лист;
- фрагмент графенового слоя, содержащий комбинированный линейный дефект 5-7;
- фрагмент графенового слоя, содержащий комбинированный точечный дефект 5-7-7-5;
- фрагмент графенового слоя, содержащий комбинированный точечный дефект 5-8-5;
- фрагмент графенового слоя, содержащий простой топологический дефект пятиугольник;
- фрагмент графенового слоя, содержащий простой топологический дефект семиугольник;
- углеродная нанотрубка, содержащая простой топологический дефект пятиугольник;
- углеродная нанотрубка, содержащая простой топологический дефект семиугольник.

Исследование структуры графеновых слоев, содержащих различные топологические дефекты, было выполнено методами молекулярной механики с силовым полем ММ+. Проведя геометрическую оптимизацию при градиенте 0,01 кКал/А·моль, рассчитали энергию для каждой вышеуказанной углеродной наноструктуры.

Следующим этапом осуществлялось моделирование молекул, таких как: ацетон (C_3H_6O), аммиак (NH_3), ацетонциангидрин (C_4H_7NO), бензол (C_6H_6), винилхлорид (C_2H_3Cl), двуокись серы (SO_2), диметиламин ($(CH_3)_2NH$), диметилформаид (C_3H_7NO), метанол (CH_3OH), нафталин ($C_{10}H_8$), окись этилена (C_2H_4O), пропилен (C_3H_6), сероводород (H_2S), сероуглерод (CS_2), уксусная кислота (CH_3COOH), формальдегид (CH_2O), хлороформ ($CHCl_3$), эпихлоргидрин (C_3H_5ClO).

Далее рассчитывалась энергия отдельных молекул, а также энергия системы, состоящая из молекулы и одной из представленных дефектных углеродных наноструктур.

Расчет энергии связи системы производится по формуле:

$$E_{\text{bond}} = E_{\text{plate}} + E_{\text{molecule}} - E_{\text{system}}, \quad (1.1)$$

где E_{plate} – энергия дефектной углеродной наноструктуры, (2.4)

E_{molecule} – энергия молекулы,

E_{system} – энергия системы, состоящая из молекулы и дефектной углеродной наноструктуры.

Расчеты энергии связи для нескольких молекул представлены в таблице 1.

Таблица 1 – Адсорбционная энергия дефектных углеродных наноструктур

	Ацетон	Бензол	Винилхлорид	Двуокись серы	Метанол	Нафталин	Пропилен
Графен	-345,1	-342,6	-345,9	-347,3	-348,3	-337,6	-345,8
Графен 5-7	-203,7	-200,5	-204,5	-206,2	-207,5	-194,6	-204,4
Графен 5-7-7-5	-112,4	-110,1	-113,1	-114,6	-115,6	-105,3	-112,9
Графен 5-8-5	-226,4	-224,1	-227,3	-228,6	-229,7	-219,3	-227,0
Графен 5	-806,3	-801,8	-806,6	-808,4	-810,0	-795,5	-806,2
Графен 7	-428,9	-425,4	-429,8	-431,6	-433,2	-419,3	-429,7
ДУНТ-5	-1815,1	-1812,6	-1817,0	-1819,1	-1820,7	-1804,9	-1816,6
ДУНТ-7	-1598,8	-1595,7	-1601,4	-1602,1	-1605,1	-1587,6	-1599,5

Проведенные расчеты показали, что дефектные углеродные наноструктуры наиболее чувствительны к нафталину (рисунок 1 а) и бензолу (рисунок 1 б). Это объясняется сильной нековалентной адсорбцией, которая возникает при взаимодействии бензольных циклов в stacking-координации молекулярных структур.

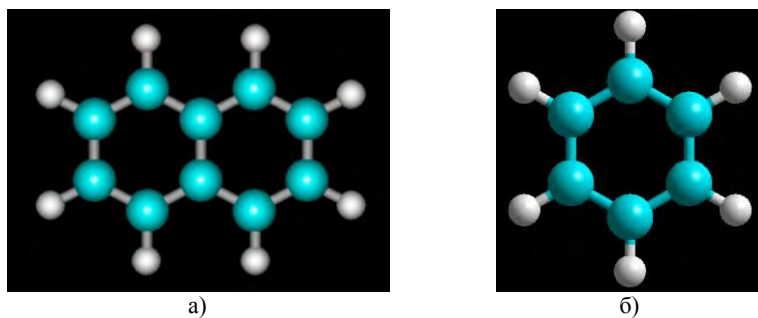


Рисунок 1 – Молекула а) нафталина, б) бензола

Литература

1. Григоренко Т.И. Генерация спиральных и дефектных углеродных наноструктур для молекулярно-динамического моделирования / Т.И. Григоренко, В.В. Баркалин // НИРС МСФ – 2014. Сборник научных трудов по материалам студенческих научно-технических конференций машиностроительного факультета. – Минск: БНТУ, 2014 – с. 9-13
2. Григоренко Т.И. Разработка атомно-молекулярных моделей дефектных графеновых структур / Т.И. Григоренко, В.В. Баркалин // НИРС МСФ – 2015. Сборник научных трудов по материалам студенческих научно-технических конференций машиностроительного факультета. – Минск: БНТУ, 2015 – с. 55-60