

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Уфимский государственный нефтяной технический университет»

Кафедра Технология нефти и газа

ОТЧЕТ

по лабораторной работе

на тему «Исследование молекулярной структуры графеновых нанолент
методом молекулярной механики»

по дисциплине «Структура углеродных материалов»

Выполнил

Субханкулов В.Р.

ст. гр. БТП-18-02

Принял

Федина Р.А.

ст. преп. каф. ТНГ, к. тех. н.

Уфа

2022

Цель работы: построение и исследование фрагмента графеновой наноленты методом молекулярной механики ММ+

Теоретическая часть: Углерод – один из самых распространенных элементов на Земле. Он обладает большим разнообразием аллотропных модификаций: алмаз, графит, фуллерен, углеродные нанотрубки, графен и др. Графит – кристаллическая аллотропная модификация углерода, представляющая из себя слои, состоящие из шестиугольников, в узлах которых находятся атомы углерода, формирующие гексагональную двумерную (2D) решетку, расположенные друг на другом.

Один графитовый слой хорошо известен как моноатомный или однослойный графен, два и три графитовых слоя называют двухслойным и трехслойным графеном соответственно. Графен до 10 слоев обычно считают несколькослойным, а 20-30 слоев называют многослойным графеном или нанокристаллическим тонким графитом.

Структура графита и графена изображена на рисунке 1

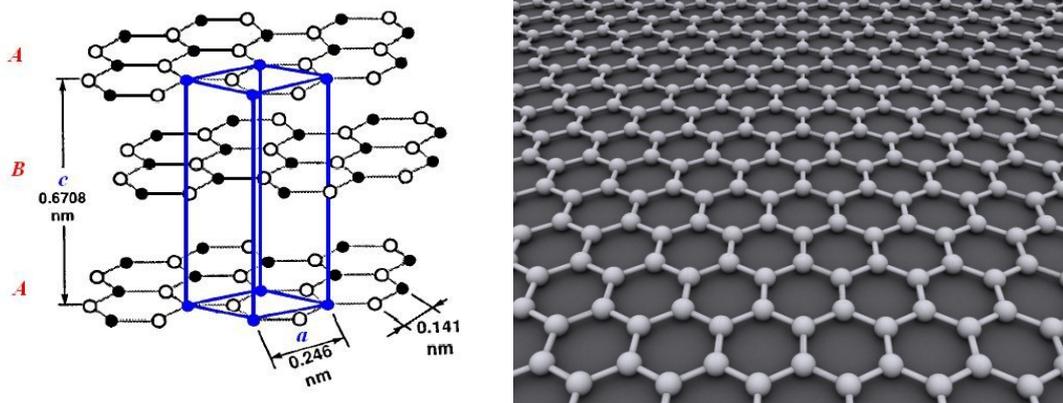


Рисунок 1 – Структура графита (а.) и 3D модель структуры однослойного графена (б.).

Графен можно допировать атомами других элементов, таких как азот, фтор, водород, кислород и др., изменяя его свойства. Все это делает его интересным материалом для многих перспективных приложений.

Таблица 1 – Физические свойства графена

Физическое свойство	Показатель для графена
Оптический коэффициент пропускания	97,7 %
Теплопроводность	5000 Вт/м·К
Удельная площадь поверхности	2630 м ² /г
Прочность на разрыв	42 Н/м
Модуль Юнга	1,1 ТПа
Подвижность носителей заряда	200 000 см ² /В·с

Для расчета геометрии молекул необходимо знать потенциалы полей химических и вандерваальсовых сил. Метод молекулярной механики в среде HyperChem позволяет учитывать это. Метод ММ+ применим для большинства углеводородных и гетероатомных молекул, в которых отсутствуют внутримолекулярные взаимодействия типа водородных связей, и учитывает потенциальные поля, образуемые всеми атомами молекул.

Для расчета заряда на атомах и распределения кулоновского потенциала поля в окрестностях наночастицы используется полуэмпирический метод PM3. Метод PM3 является расширенным вариантом метода AM1, который в свою очередь является модификацией метода MNDO (modified neglect of diatomic overlap – модифицированное пренебрежение двуатомным перекрыванием) путем замены слейтеровских функций гауссовскими.

Практическая часть:

Вариант 14

Число бензольных колец	Количество удаленных бензольных колец	Количество концевых замещённых атомов углерода	Тип концевых заместителей атомов углерода

48

1 - 8

8

Cl

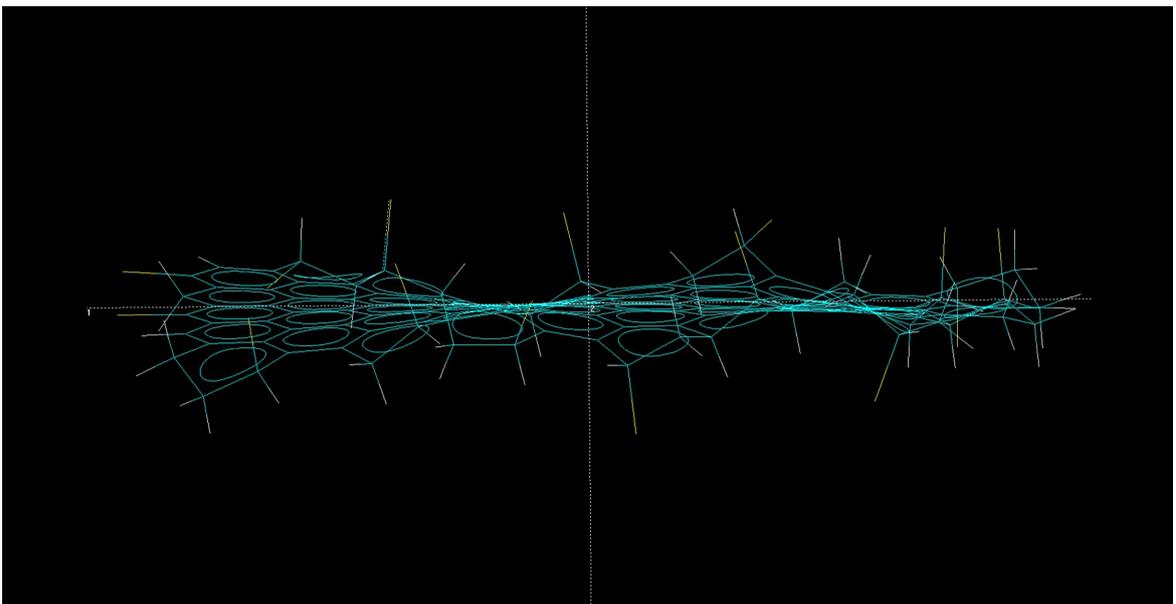
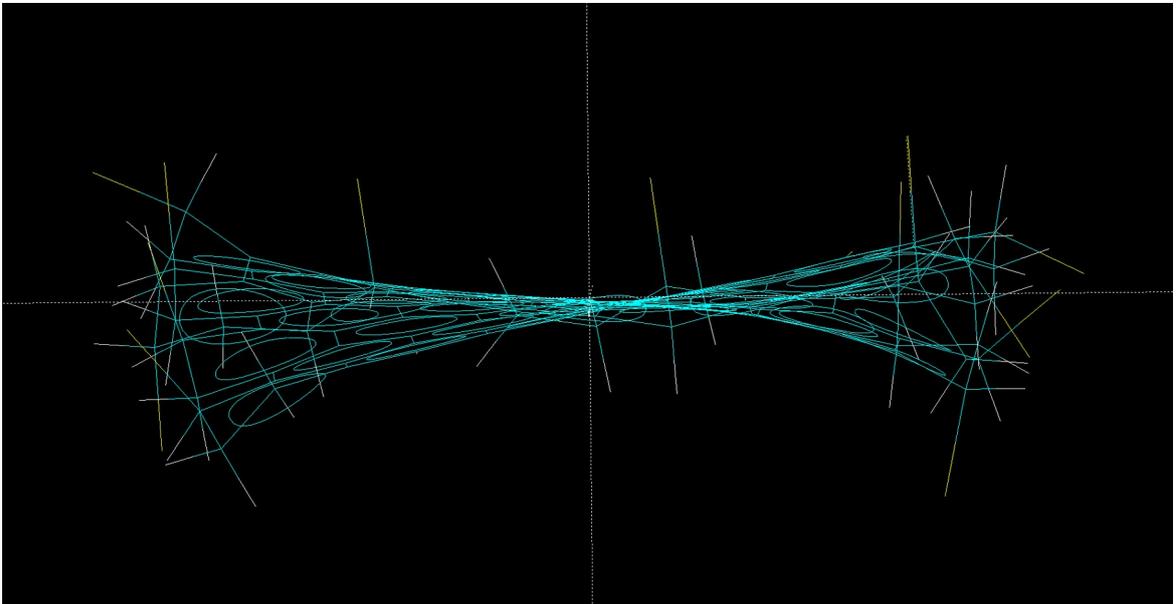
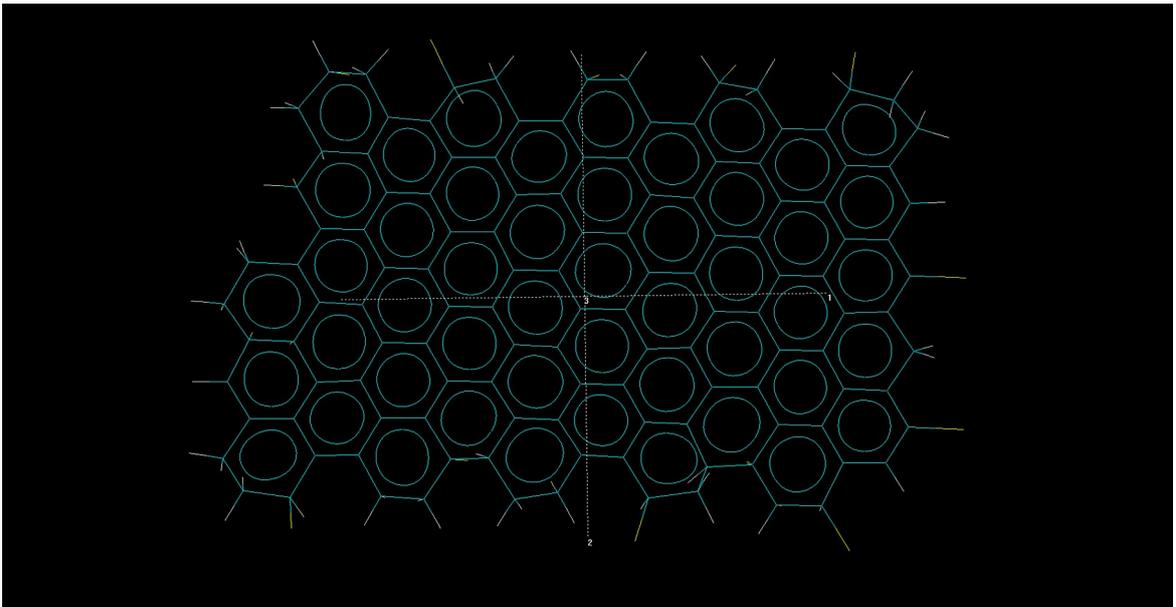


Рисунок 2 – Исходная структура наночастицы

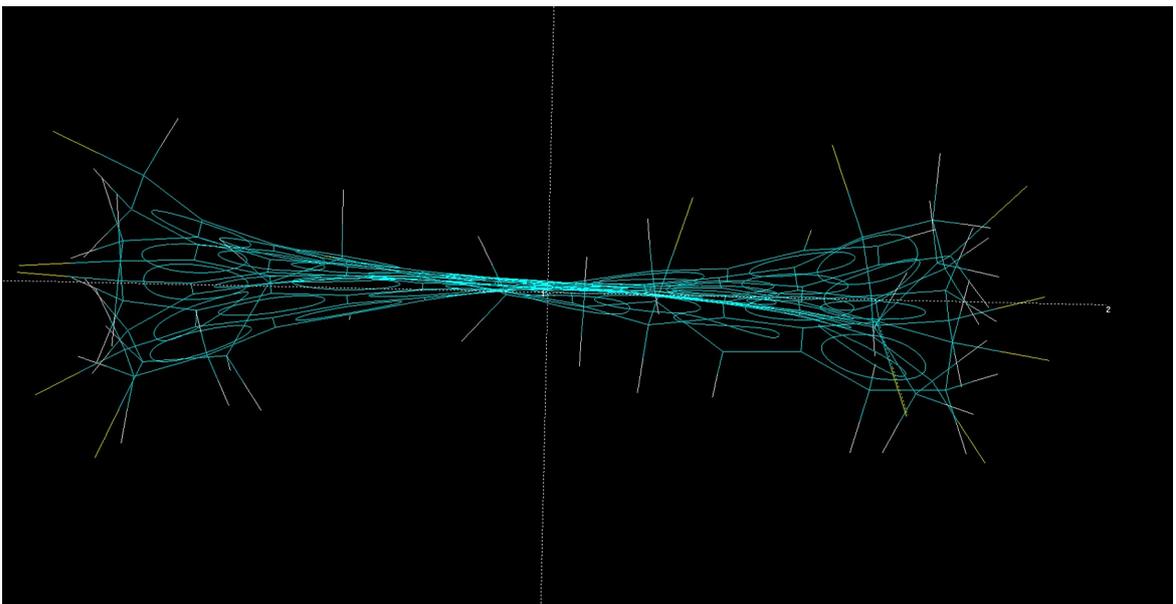
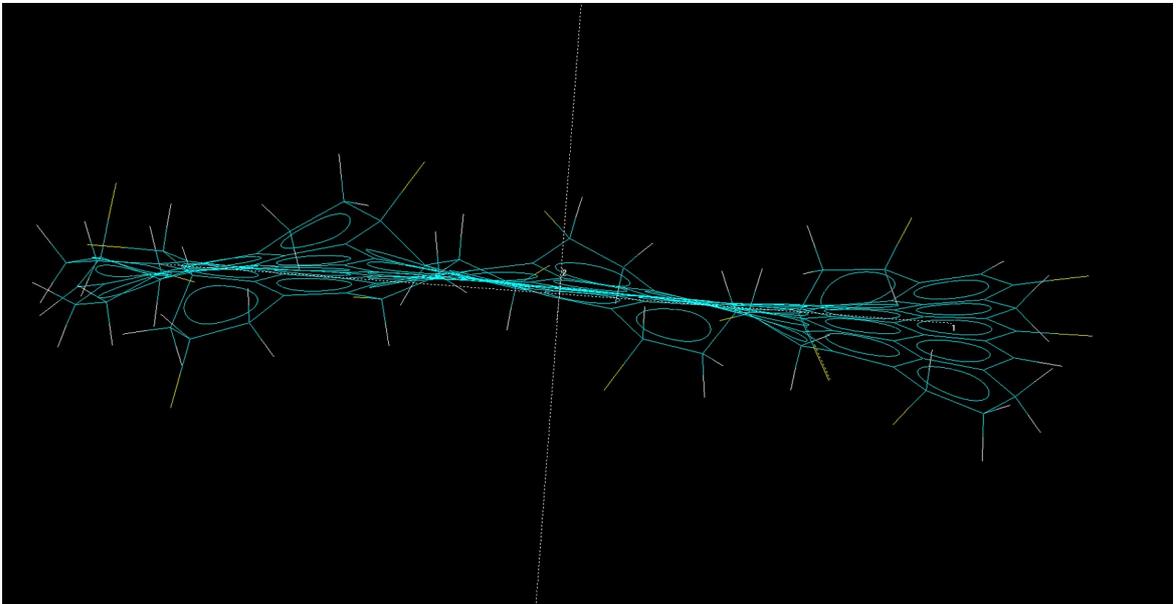
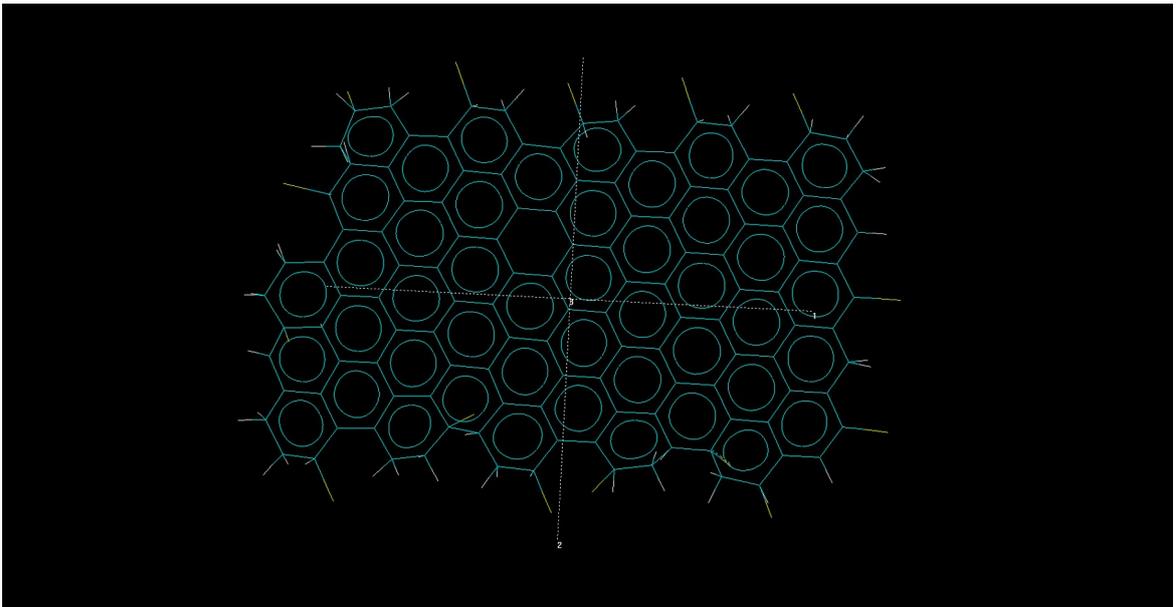


Рисунок 3 – Наночастица с одним удаленным бензольным кольцом

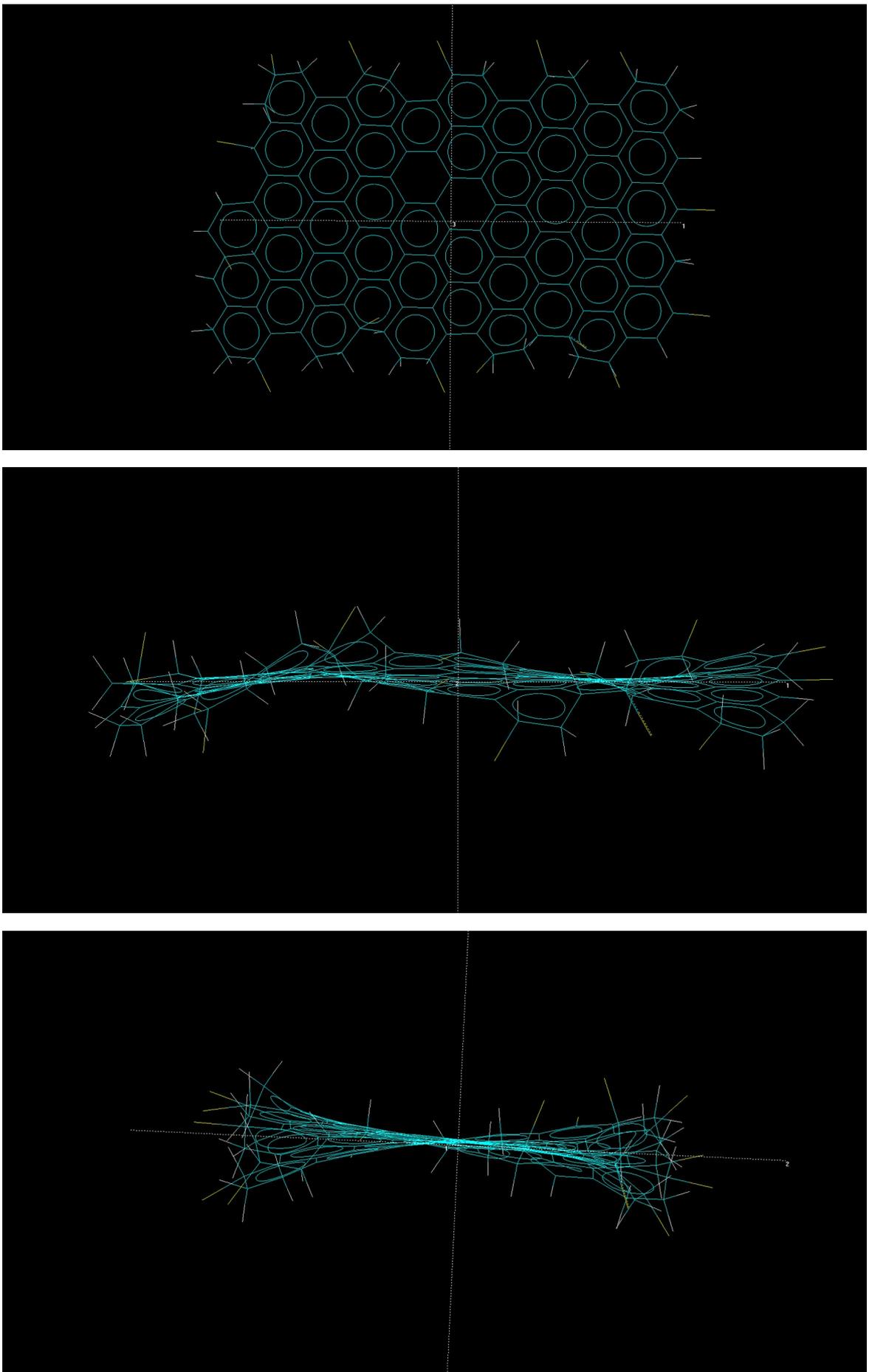


Рисунок 4 – Наночастица с двумя удаленными бензольными кольцами

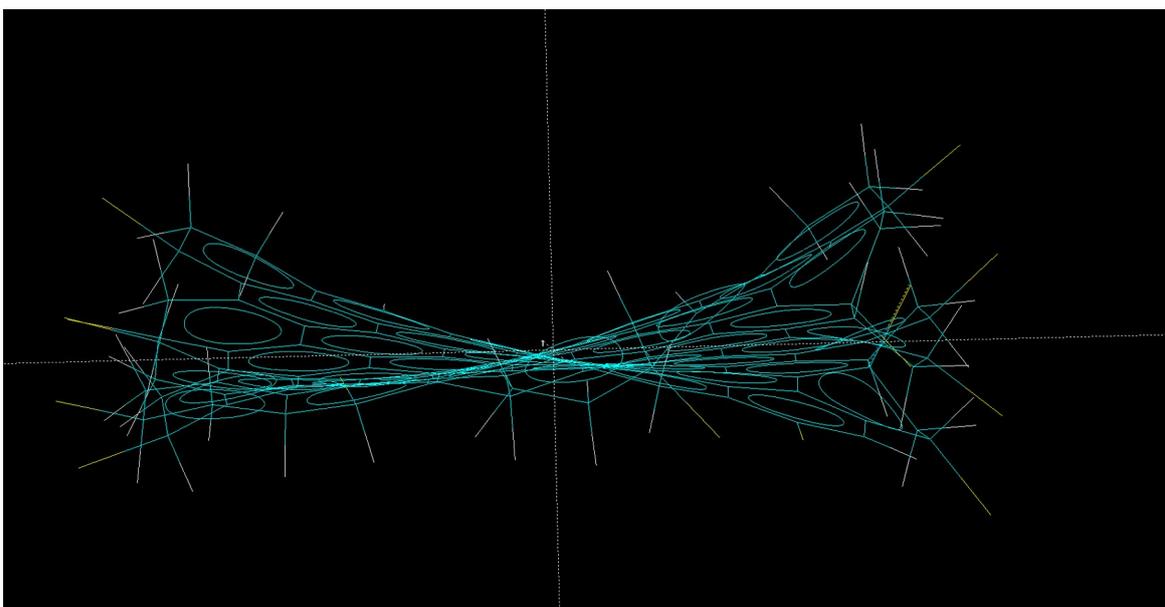
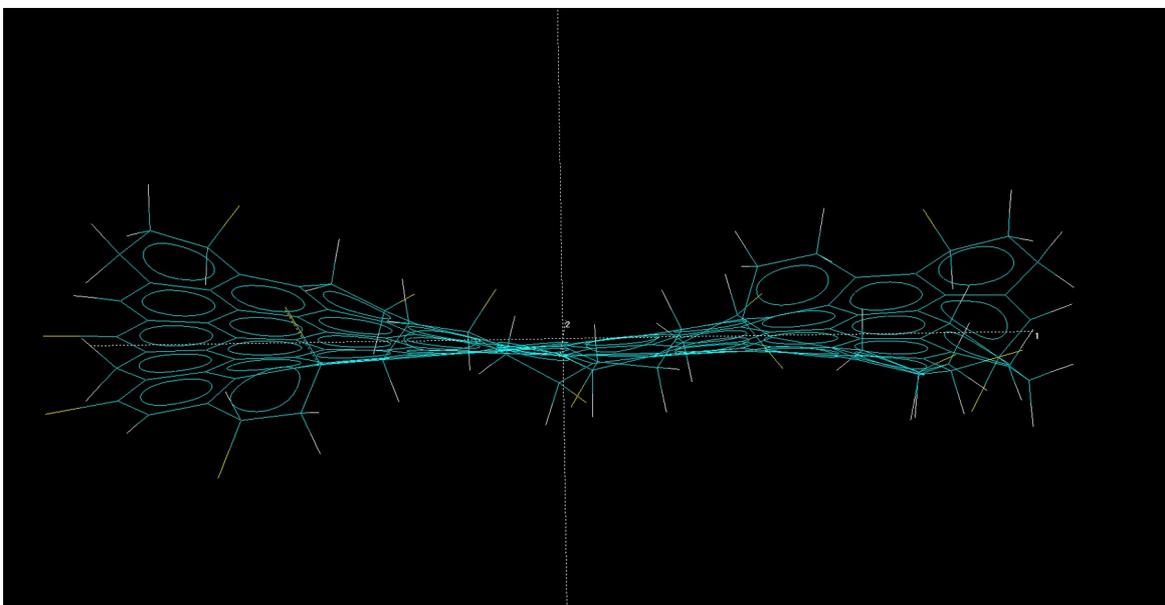
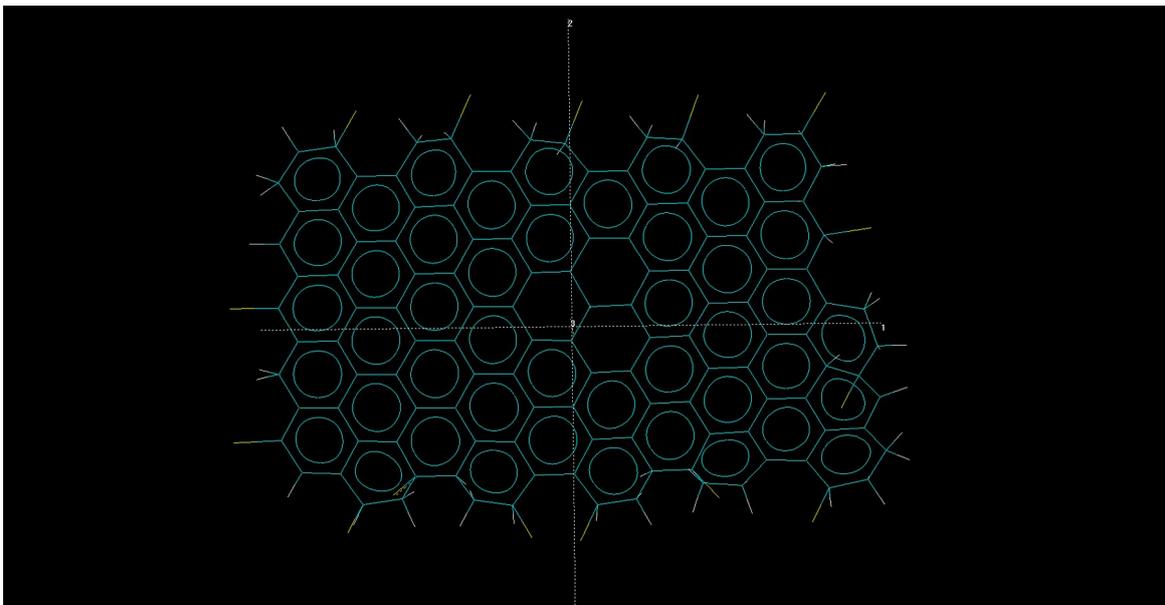


Рисунок 5 – Наночастица с тремя удаленными бензольными кольцами

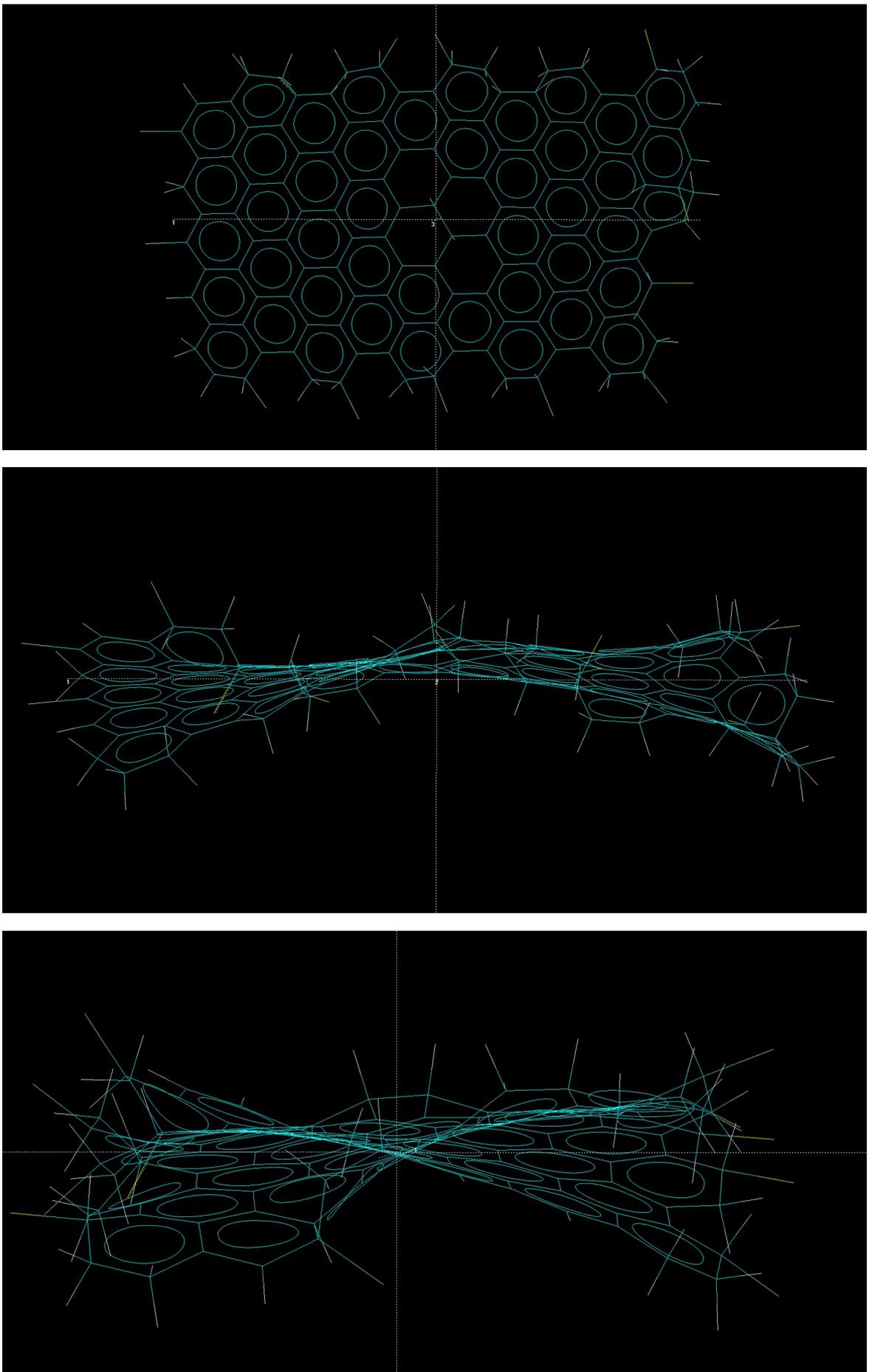


Рисунок 6 – Наночастица с четырьмя удаленными бензольными кольцами

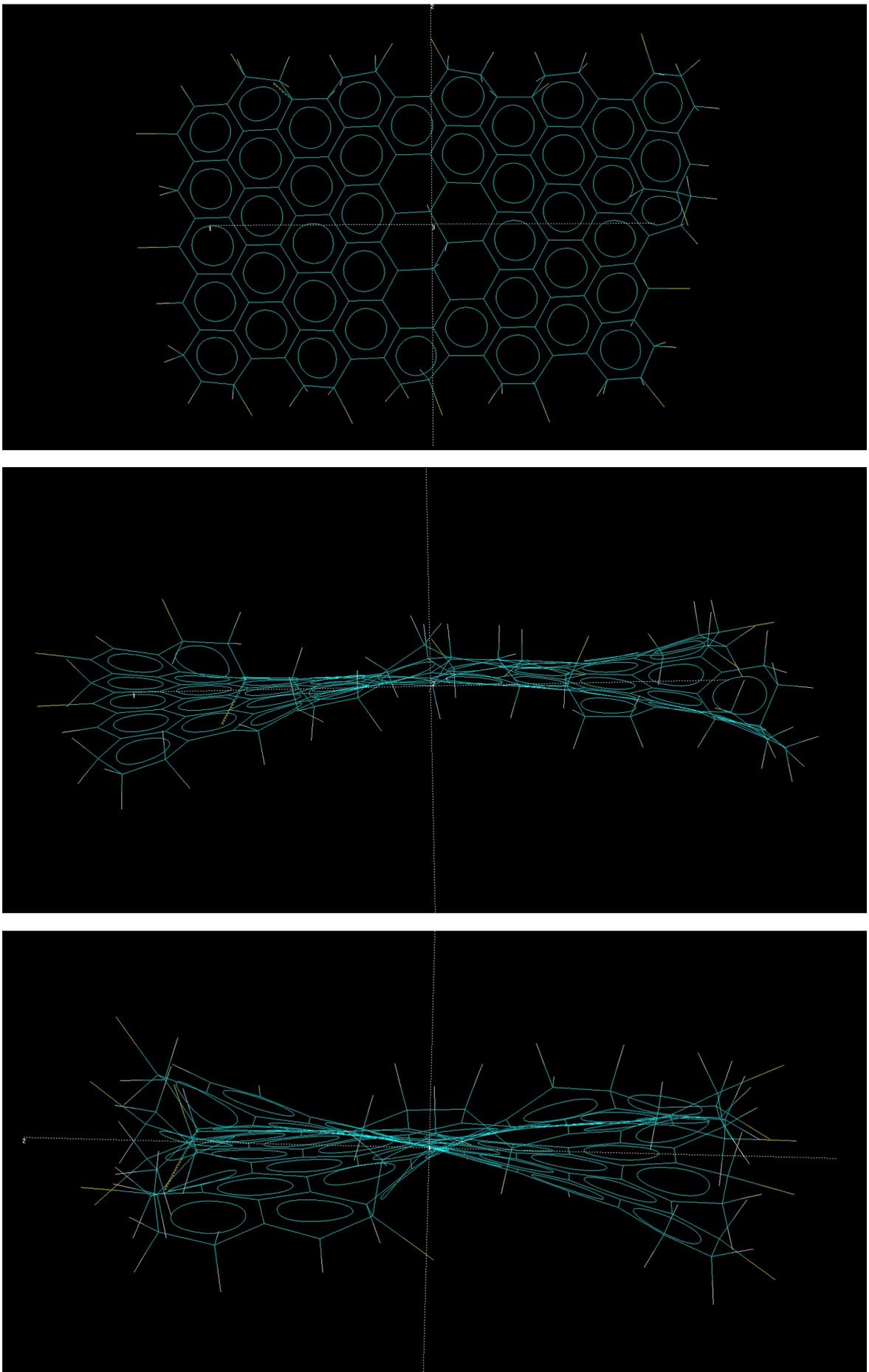


Рисунок 7 – Наночастица с пятью удаленными бензольными кольцами

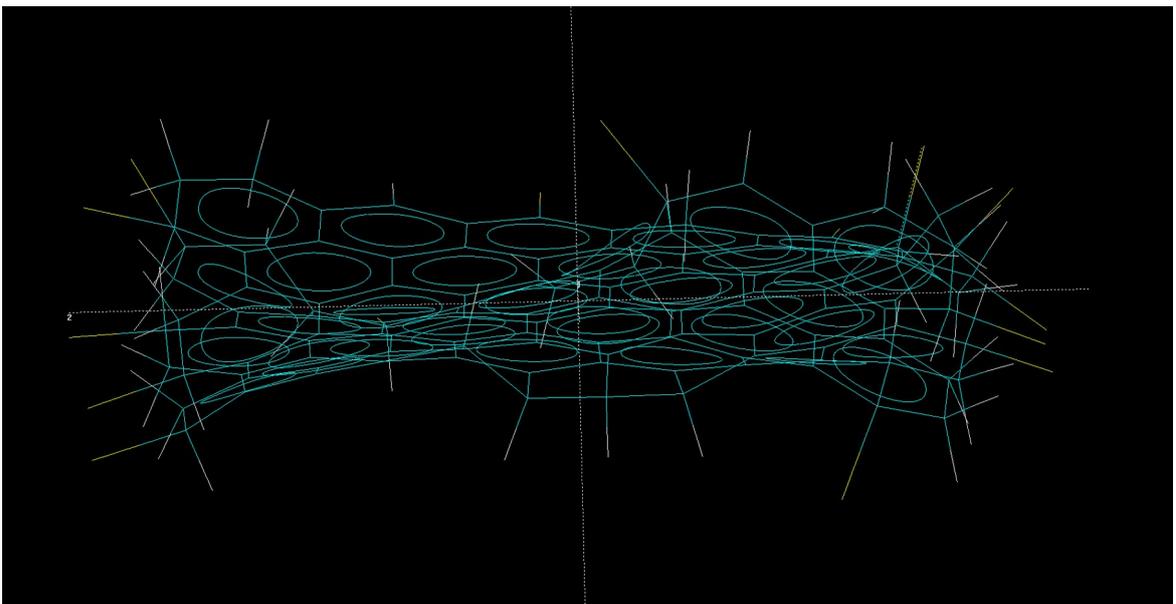
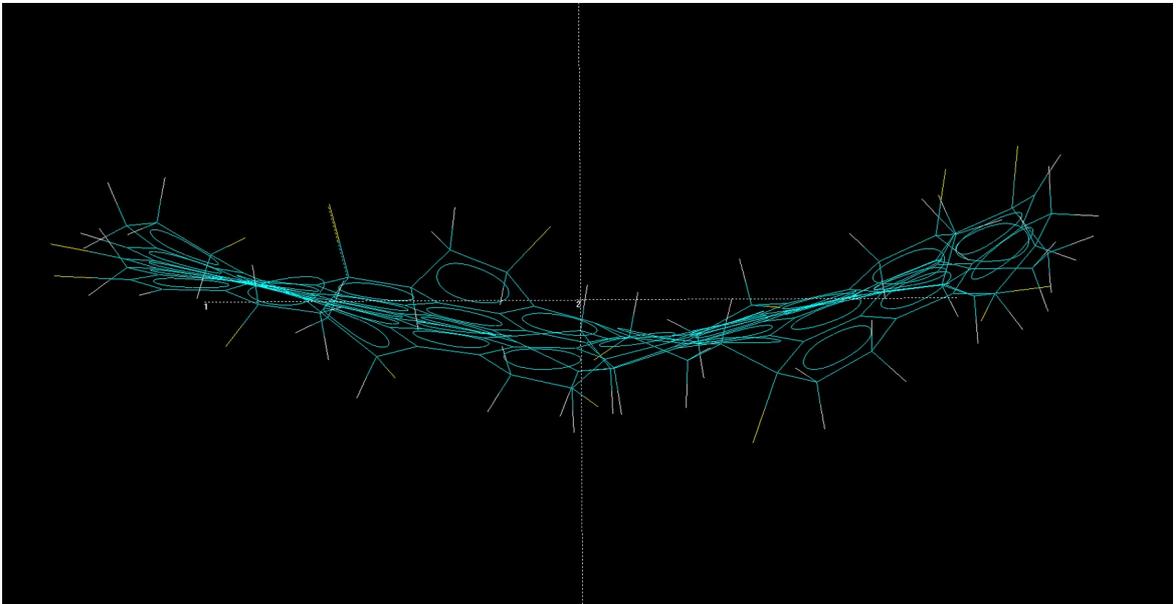
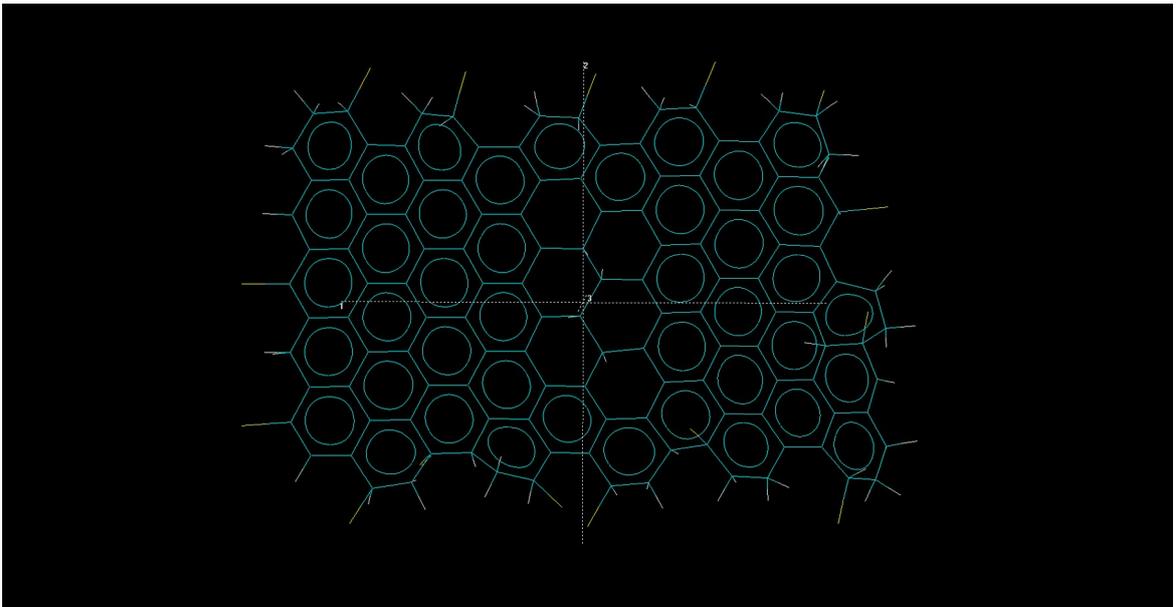


Рисунок 8 – Наночастица с шестью удаленными бензольными кольцами

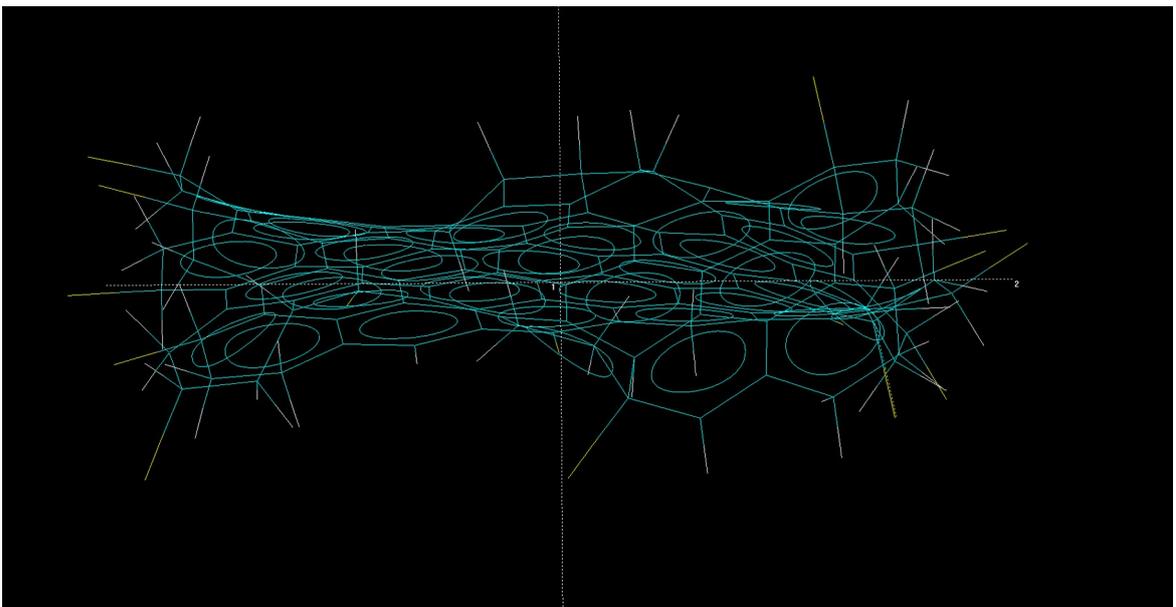
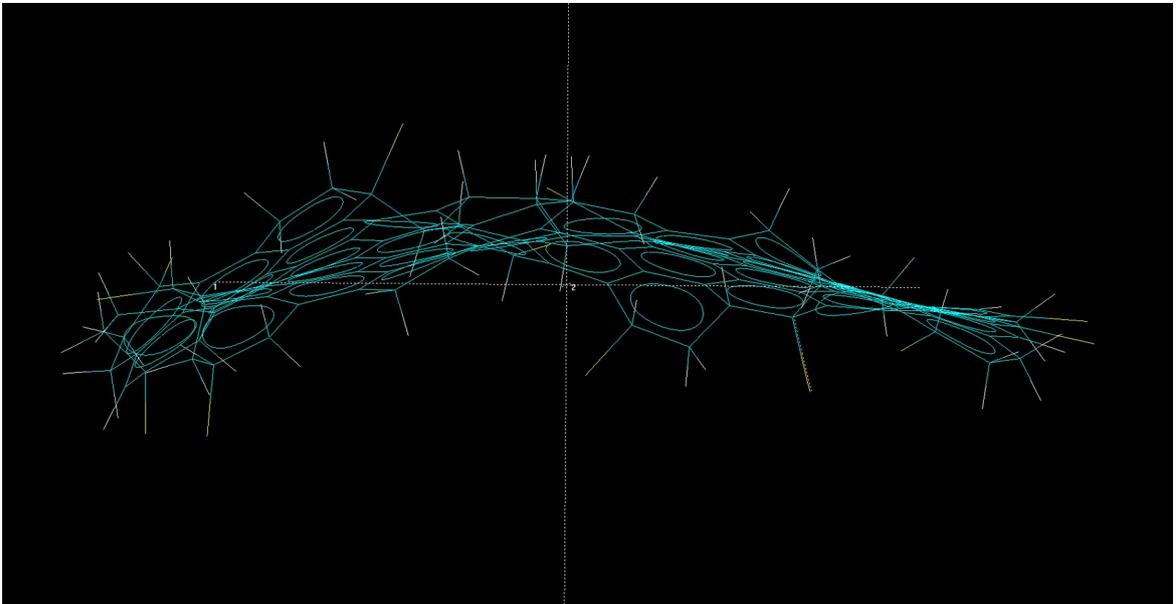
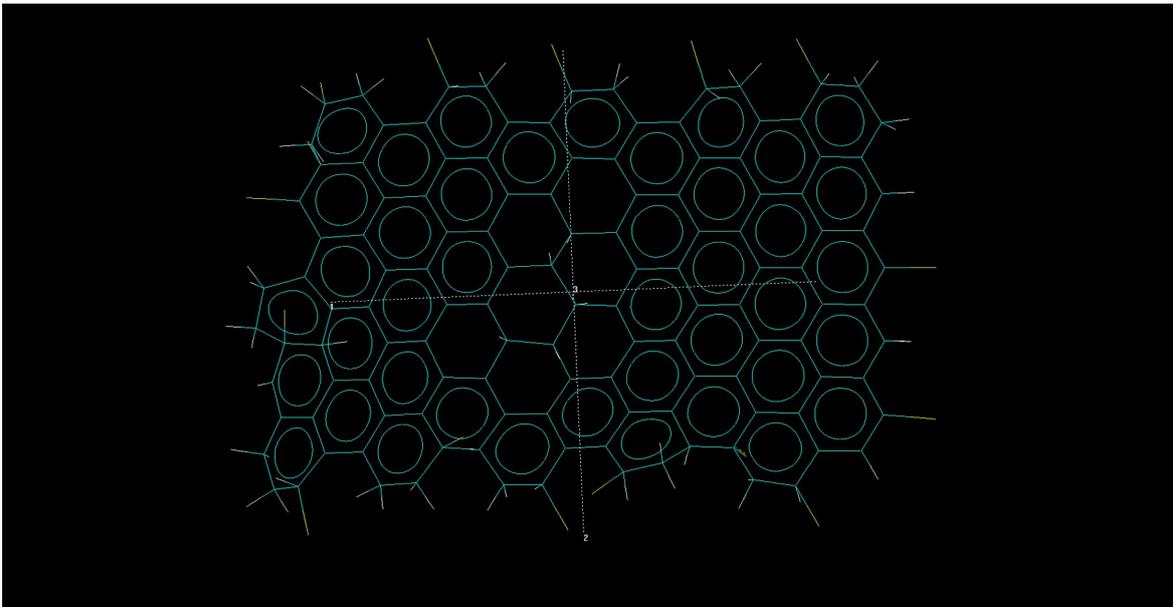


Рисунок 9 – Наночастица с семью удаленными бензольными кольцами

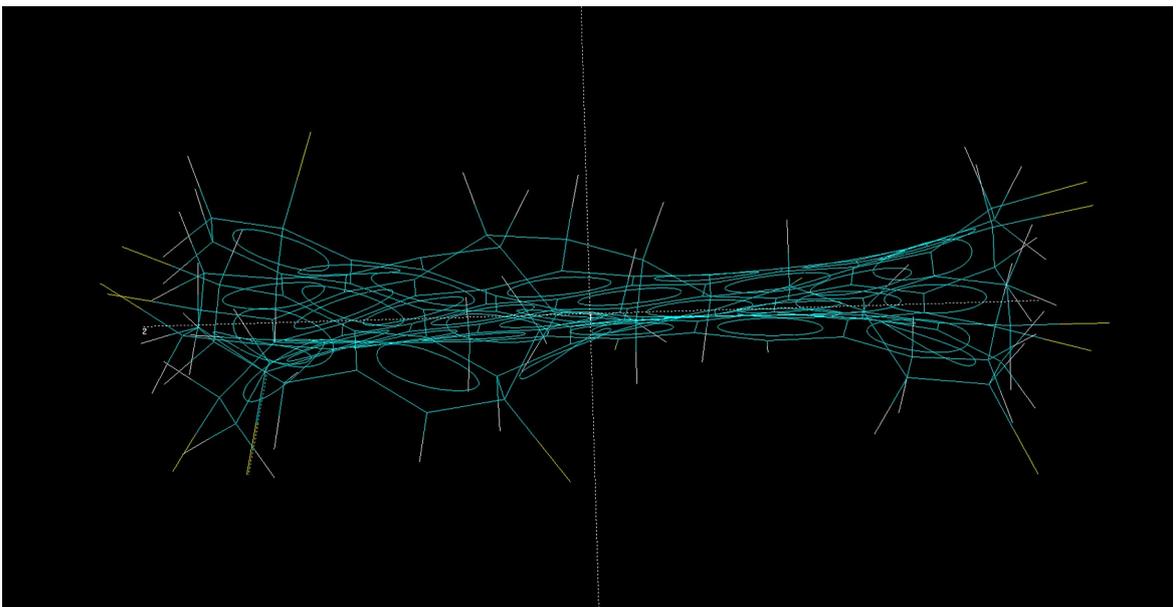
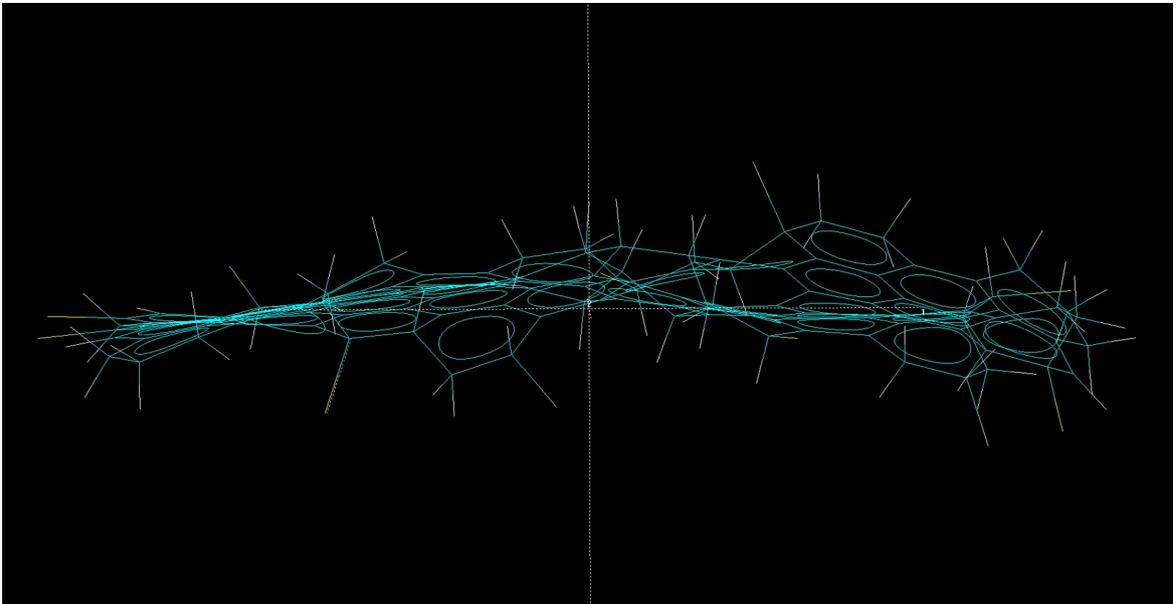
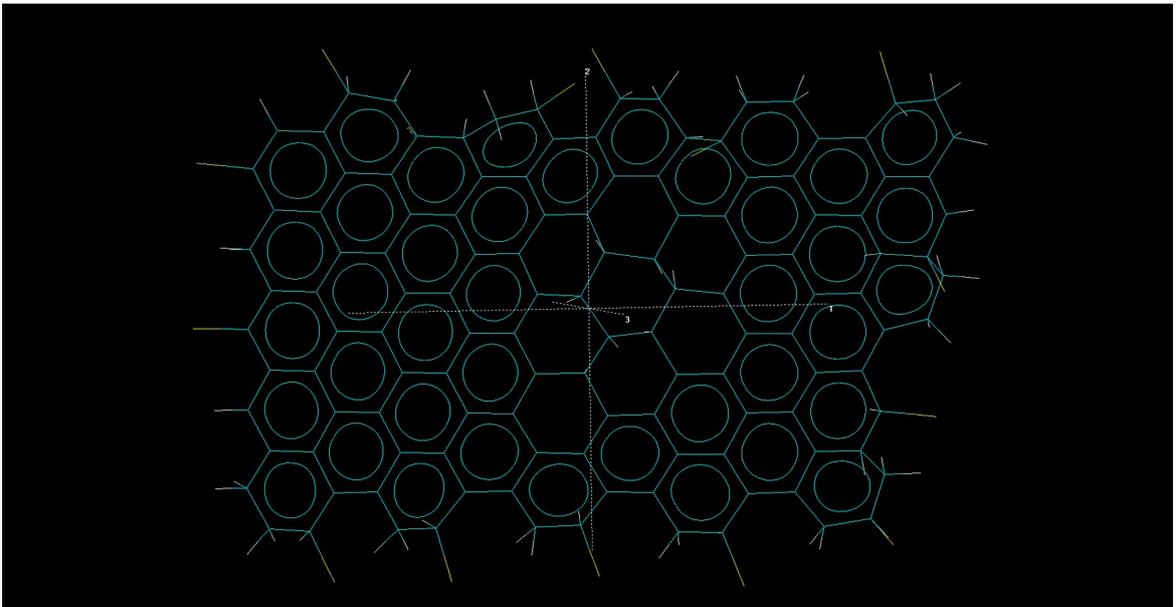


Рисунок 10 – Наночастица с восемью удаленными бензольными кольцами

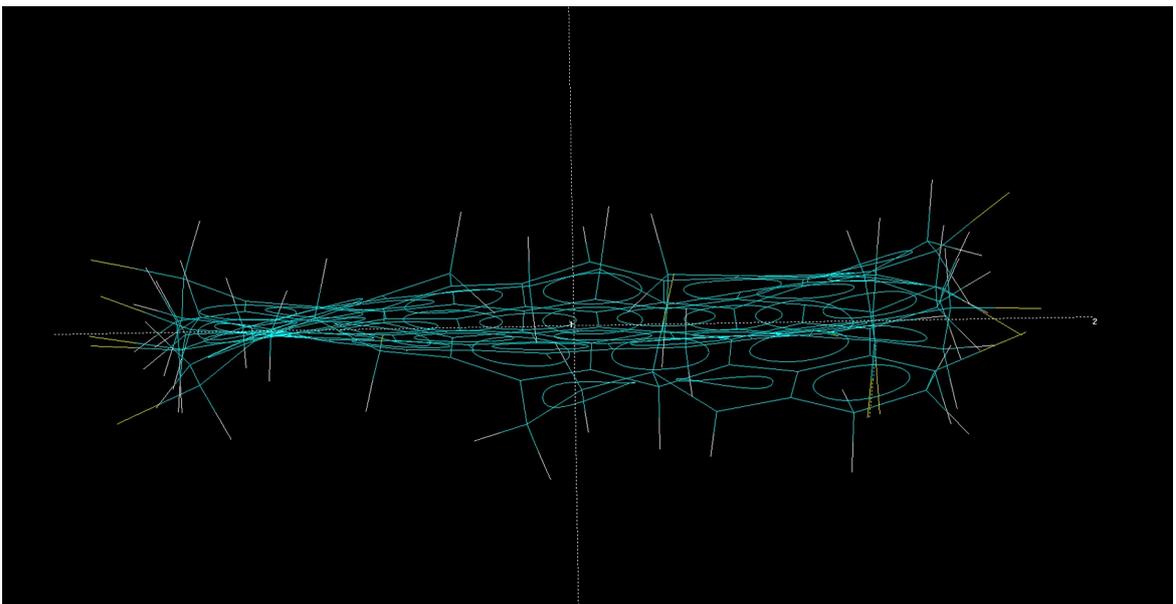
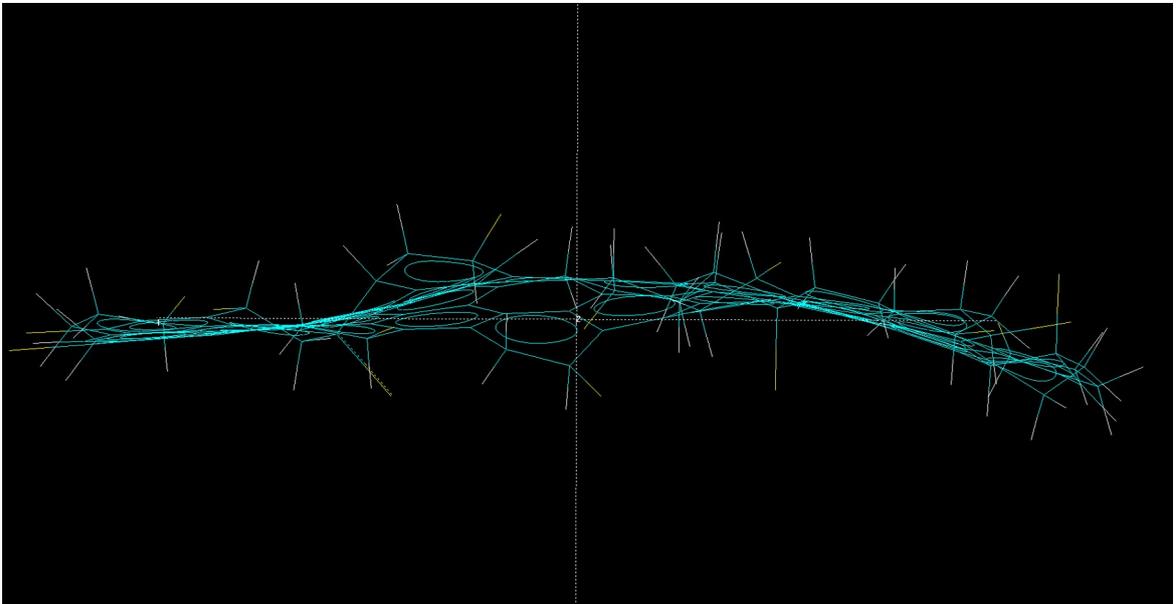
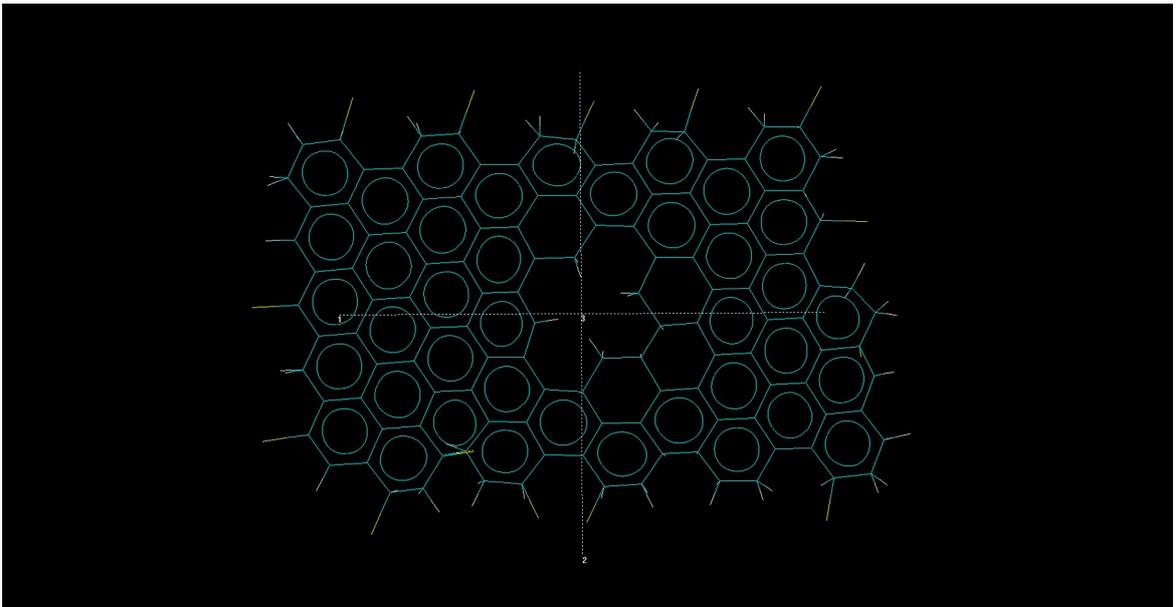


Рисунок 11 – Наночастица с дефектом – отсутствуют два атома углерода

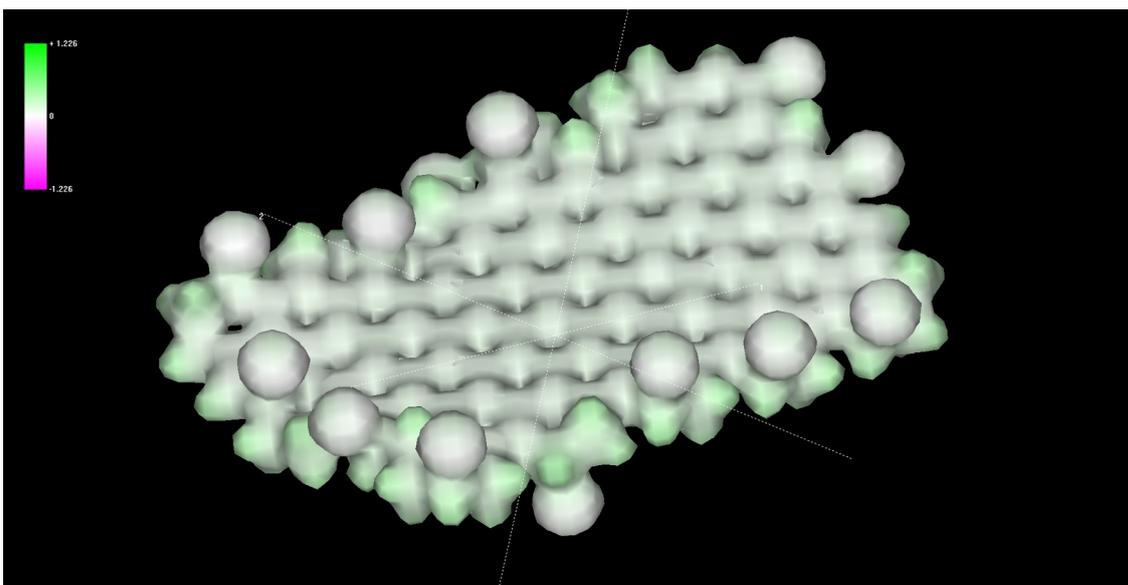
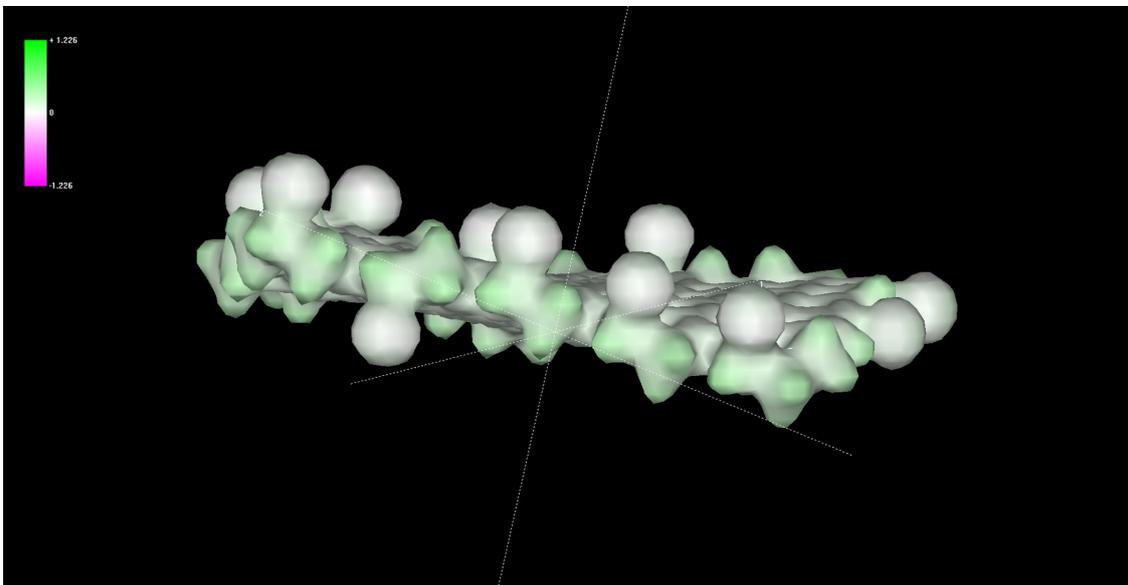
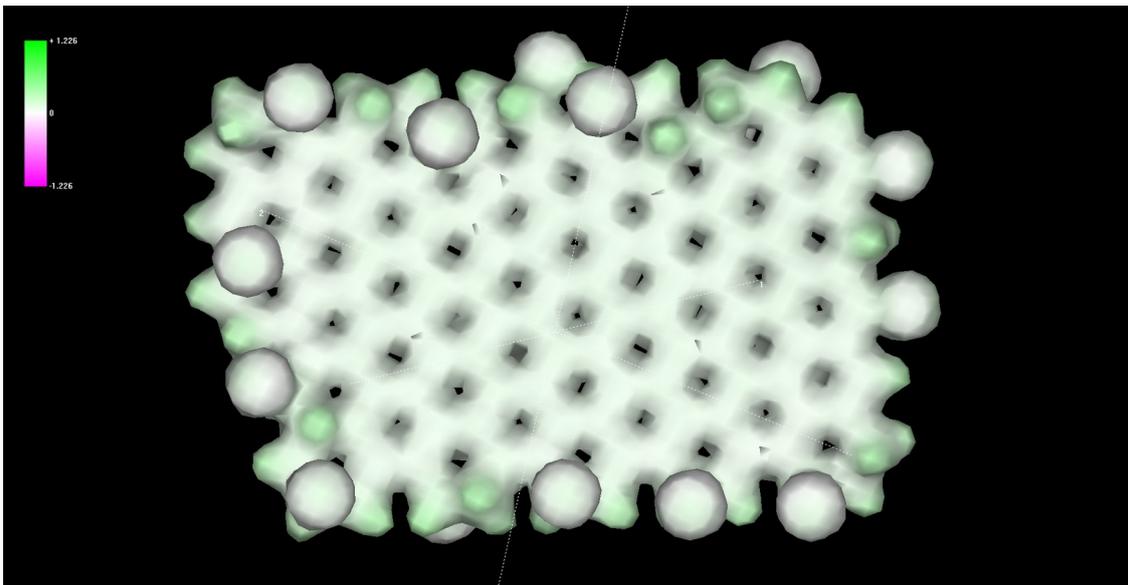


Рисунок 12 – Распределение кулоновского потенциала поля в окрестностях наночастицы

Таблица 2 – Результаты расчета искомых параметров

	Энергия частицы, kcal/mol	Дипольный момент, D	Т/д устойчивость, kcal/mol	Энергия образования дефекта, eV	Длина волны, nm
Без дефекта	1345,0836	10.47	-	-	-
- 1 кольцо	1451,8792	2.116	106,7955	4,6433	267,05
- 2 кольца	1455,2606	2.344	110,1770	4,7903	258,86
- 3 кольца	1475,0339	0.3131	129,9503	5,6500	219,47
- 4 кольца	1484,9540	2.451	139,8704	6,0813	203,90
- 5 колец	1487,6465	2.312	142,5629	6,1984	200,05
- 6 колец	1500,3792	3.181	155,2955	6,7520	183,65
- 7 колец	1517,7462	3.452	172,6626	7,5071	165,18
- 8 колец	1530,7998	4,5717	185,7162	8,0746	153,57
- 2 атома С	1547,8092	1.622	202,7256	8,8142	140,68
PM3	-472061,9375	8.165	-	-	-

Вывод: В ходе работы научились анализировать оптимальную геометрию графеновых нанолент и овладели методом молекулярной механики ММ+ для расчета структуры графеновой наноленты.

Исходная графеновая наночастица приняла форму гиперболического параболоида, при различных дефектах структура менялась от сильно выгнутой до практически плоской.

По полученным данным для исходной наночастицы длины волн для образования принятых дефектов лежат в коротковолновом ультрафиолетовом свете.