

УДК 538.935

Волобуева Ирина Игоревна
Студент магистратуры
Институт приоритетных технологий
Волгоградский государственный университет
Россия, г. Волгоград

**ВНЕДРЕНИЕ АТОМОВ В МЕЖСЛОЕВОЕ ПРОСТРАНСТВО
ПИРОЛИЗОВАННОГО ПОЛИАКРИЛОНИТРИЛА ЧЕРЕЗ БОКОВУЮ
ПОВЕРХНОСТЬ**

Аннотация: В статье рассматривается процесс внедрения атомов щелочных металлов в межслоевое пространство пиролизованного полиакрилонитрила. Впервые были установлены особенности механизма множественного заполнения межслоевого пространства двухслойного пиролизованного полиакрилонитрила через боковую грань системы атомами щелочных металлов (Li, Na, K) и исследованы основные энергетические характеристики.

Ключевые слова: Пиролизированный полиакрилонитрил, атом щелочного металла, литий, натрий, калий, MNDO, энергия.

Volobueva Irina Igorevna
graduate student
Institute of Priority Technologies
Volgograd State University
Russia, Volgograd

**INTRODUCTION OF ATOMS IN THE INTERLAYER SPACE OF
PYROLYZED POLYACRYLONITRILE THROUGH THE SIDE SURFACE**

Abstract: *The article discusses the process of introduction of alkali metal atoms into the interlayer space of pyrolyzed polyacrylonitrile. For the first time, features of the mechanism of multiple filling of the interlayer space of two-layer pyrolyzed polyacrylonitrile across the lateral face of the system with atoms of alkali metals (Li, Na, K) were established and the basic energy characteristics were investigated.*

Keywords: *Pyrolyzed polyacrylonitrile, alkali metal atom, lithium, sodium, potassium, MNDO, energy.*

В качестве объекта исследования был выбран двухслойный пиролизованный полиакрилонитрил, в монослое которого помимо атомов углерода, содержалось 20% атомов азота, расстояние между слоями составило 1,4Å. Проводилось внедрения атома металлов через боковую поверхность двухслойного пиролизованного полиакрилонитрила. Процесс внедрения моделировался пошаговым приближением (шаг 0.1 Å) атома щелочного металла к фиктивному атому, расположенному в центре между слоями. Расчеты проводились с использованием схем MNDO в рамках модели молекулярного кластера. Геометрия системы оптимизировалась в процессе расчета. Пошаговое приближение атома металла к двухслойному ППАН позволило построить профиль поверхности потенциальной энергии системы «двухслойный ППАН – атом Me» (рис. 1). Для проникновения в межслоевое пространство атомы металла должны преодолеть энергетический барьер E_a , попав в межплоскостное пространство, атомы металла оказываются в стабильном состоянии на расстоянии R от границы кластера. Энергия активации вычислялась как разность между полной энергией $E(R)$ системы «двухслойный пан - атом Me» на соответствующем расстоянии R и полной энергией системы на $R = \infty$: $E_i = E(R_i) - E(\infty)$, где $i = a$.

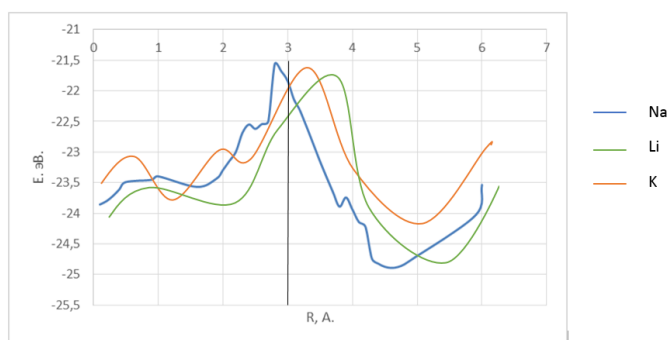


Рис. 1. Профиль поверхности потенциальной энергии взаимодействия атомов металла с двухслойным ППАН

Процесс заполнения межплоскостного пространства ППАН атомами щелочных металлов: была исследована возможность заполнения межслоевого пространства пиролизованного полиакрилонитрила атомами натрия, калия и лития. В присутствии одного атома металла между слоями полимера происходило внедрение второго атома. Рассматривалось два варианта внедрения:

1) Атом металла внедрялся через боковую поверхность, вдоль линии соединяющей внедряемый атом с атомом, находящимся в межплоскостном пространстве ППАН.

2) Атом металла внедрялся через боковую поверхность, вдоль линии соединяющей внедряемый атом с фиктивной точкой, находящейся от внедренного атома на расстоянии, соответствующим параметру кристаллической решетки.

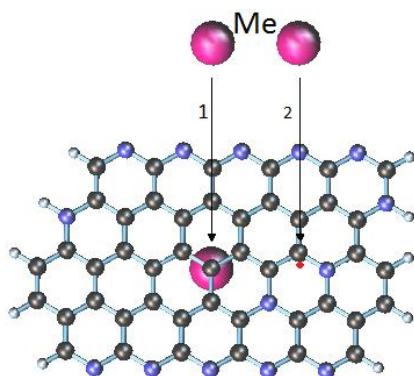


Рис. 2. Два варианта внедрения атома металла в межплоскостное пространство пиролизованного полиакрилонитрила

Внедрение атома щелочного металла моделировалось пошаговым приближением к атому металла, находящемуся в межслоевом пространстве полимера или фиктивной точке с шагом 0.1 \AA . Пошаговое приближение атома Me к двухслойному ППАН с атомом металла внутри позволило построить профиль поверхности потенциальной энергии системы «двухслойный ППАН+Me – атом Me» (рис. 3-4).

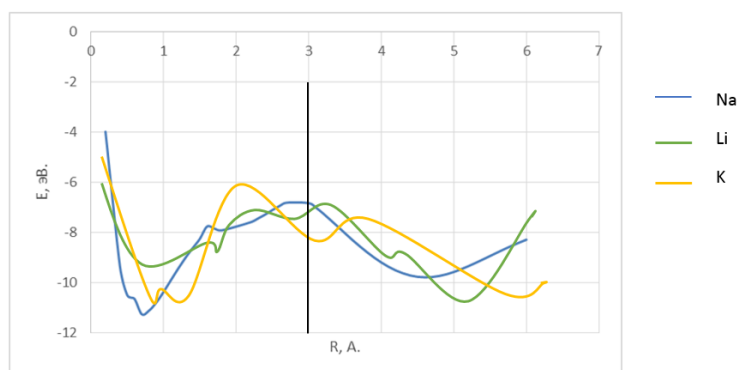


Рис. 3. Профиль поверхности потенциальной энергии внедрения атомов металлов в межслоевое пространство ППАН с атомом металла через боковую поверхность в положении 1

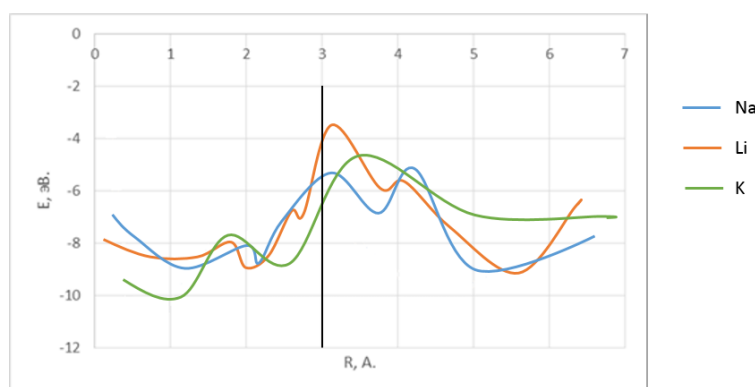


Рис. 4. Профиль поверхности потенциальной энергии внедрения атомов металлов в межслоевое пространство ППАН с атомом металла через боковую поверхность в положении 2

Рассмотрен вариант внедрения атома металла через боковую поверхность. Атом металла подходит к краю монослоя полимера, затем преодолевает потенциальный барьер, равный E_a и движется на встречу к атому металла, находящемуся в центре полости.

Использованные источники:

1. Яштулов Н.А., Лебедева М.В., Флид В.Р. Нанокompозиты на основе палладия — высокоэффективные катализаторы для химических источников тока // Известия РАН. Серия химическая. – 2015. – Т. 64, № 1. –С.24–28.
2. Хурсан, С.Л. Квантовая механика и квантовая химия: конспекты лекций / С.Л. Хурсан. – Уфа: Башкирский государственный университет. – 2005. – С. 109-117.