

## ВЛИЯНИЕ АТОМОВ НИКЕЛЯ И МЕДИ НА СВОЙСТВА И СТРУКТУРУ ПИРОЛИЗОВАННОГО ПОЛИАКРИЛОНИТРИЛА

А.Н. Панченко, студент

Волгоградский государственный университет  
(Россия, г. Волгоград)

DOI: 10.24412/2500-1000-2023-3-2-120-123

**Аннотация.** В данной статье рассматривается влияние наночастиц на структуру материалов. Объясняется, как наночастицы могут быть включены в материал, и как это может повлиять на физические, химические и механические свойства материала. Детально рассмотрен полимер – пиролизированный полиакрилонитрил в структуру которого внедрены атом меди или никеля. Расчеты выполнены полуэмпирическим методом РМб. Рассчитаны ИК-спектры, ширина запрещенной зоны, построены плотности состояний.

**Ключевые слова:** пиролизированный полиакрилонитрил, ширина запрещенной зоны, никель, медь, наночастицы.

Для изменения характеристик материала очень часто в его структуру добавляют наночастицы. Наночастицы – это крошечные частицы размером в один нанометр, что эквивалентно одной миллиардной части метра. Благодаря небольшому размеру они обладают уникальными свойствами, отличающими их от объемных собратьев. Одной из основных областей, в которой наночастицы нашли применение, является материаловедение. Наночастицы могут быть включены в различные материалы для изменения их свойств и характеристик. Добавление наночастиц в материал может изменить его микроструктуру, что приведет к изменению физических, химических и механических свойств. Наночастицы могут быть добавлены к материалу различными способами, такими как смешивание, покрытие и осаждение. Свойства наночастиц сильно зависят от их размера, формы и площади поверхности. Например, добавление наночастиц небольшого размера может увеличить площадь поверхности материала, что приведет к увеличению его реакционной способности. Точно так же включение наночастиц с высоким соотношением сторон может улучшить механические свойства материала.

Влияние наночастиц на структуру материала во многом зависит от взаимодействия между наночастицами и окружающей матрицей. Когда наночастицы включаются в материал, они могут образовать

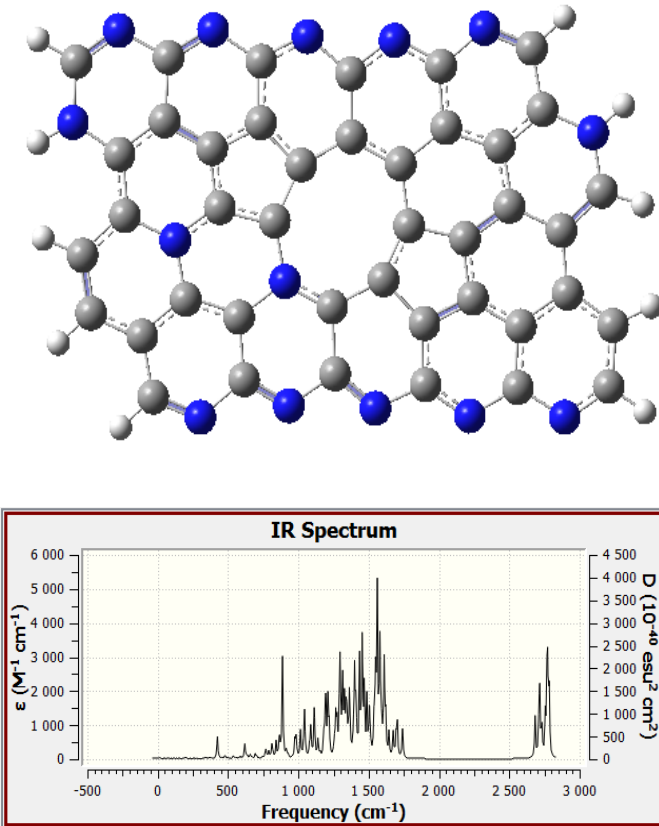
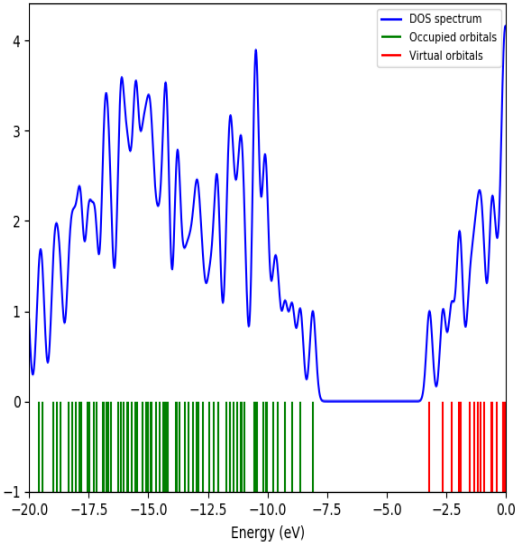
кластеры, агломераты или равномерно распределяться по всей матрице. Образование кластеров или агломератов может привести к изменению пористости и механических свойств материала. С другой стороны, однородная дисперсия наночастиц может усилить межфазную связь между наночастицами и матрицей, что приведет к улучшению механических и термических свойств. Включение наночастиц также может влиять на кристаллическую структуру материала. Например, добавление наночастиц может изменить скорость роста кристаллов, кристаллографическую ориентацию и параметры решетки. Изменения в кристаллической структуре могут привести к изменению электронных, оптических и магнитных свойств материала. Кроме того, добавление наночастиц также может привести к образованию новых фаз в материале, что приведет к изменению его физических и химических свойств. Наночастицы также могут влиять на термическую стабильность материала. Добавление наночастиц может увеличить теплопроводность и термическую стабильность материала, что приводит к улучшению рассеивания тепла и устойчивости к термическому разложению. Кроме того, введение наночастиц также может влиять на температуру плавления и поведение материала при фазовом переходе. Наночастицы также можно использовать для изменения свойств поверхности мате-

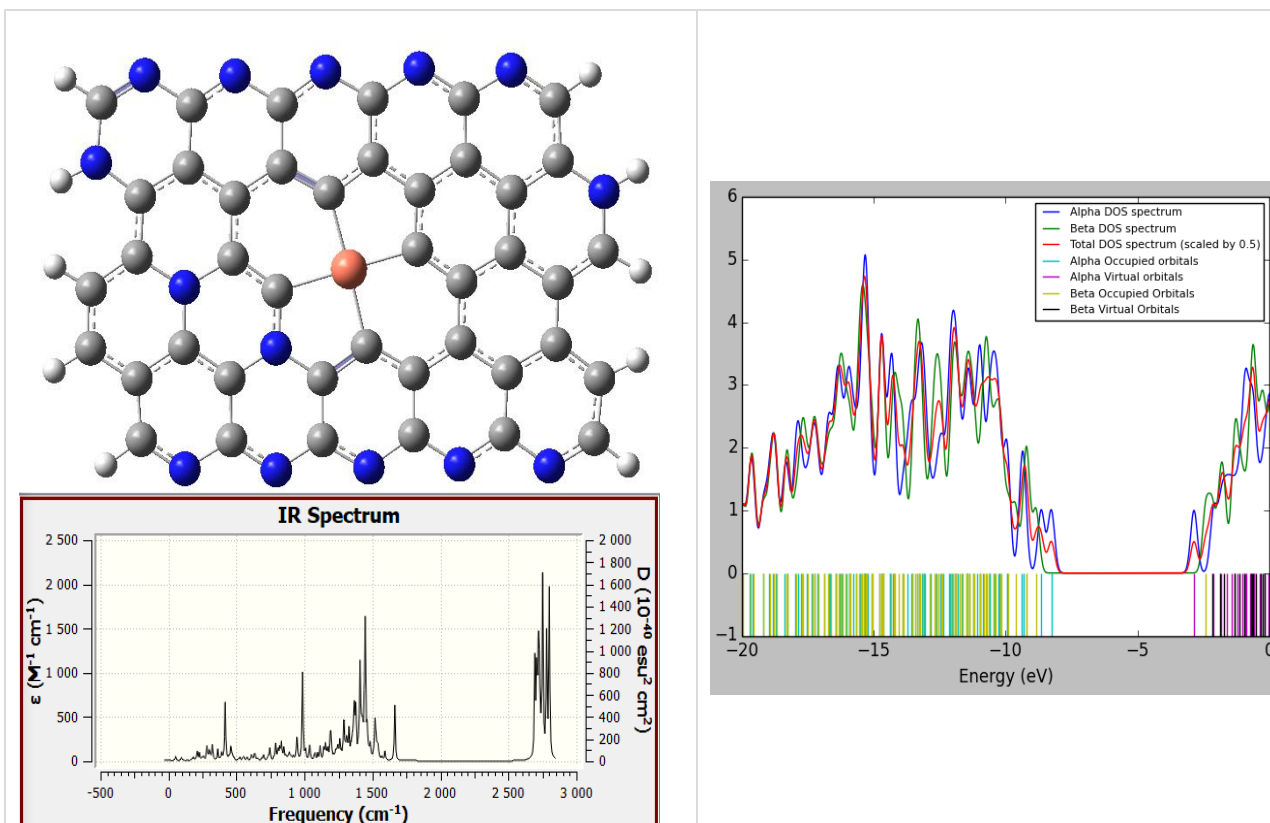
риала. Добавление наночастиц к поверхности может изменить ее смачиваемость, поверхностную энергию и адгезионные свойства. Это может привести к улучшению коррозионной стойкости и биосовместимости материала.

Более детально рассмотрим влияние наночастиц на структуре полимера-пиролизованного полиакрилонитрила (ППАН). Начнем изучение влияния наночастиц на примере одного атома. В качестве исследуемых атомов выберем атом меди и никеля. Для построения композита, рассмотрим монослой полимера в центре которого содержится вакансионный дефект. В центр этого дефекта будем по-

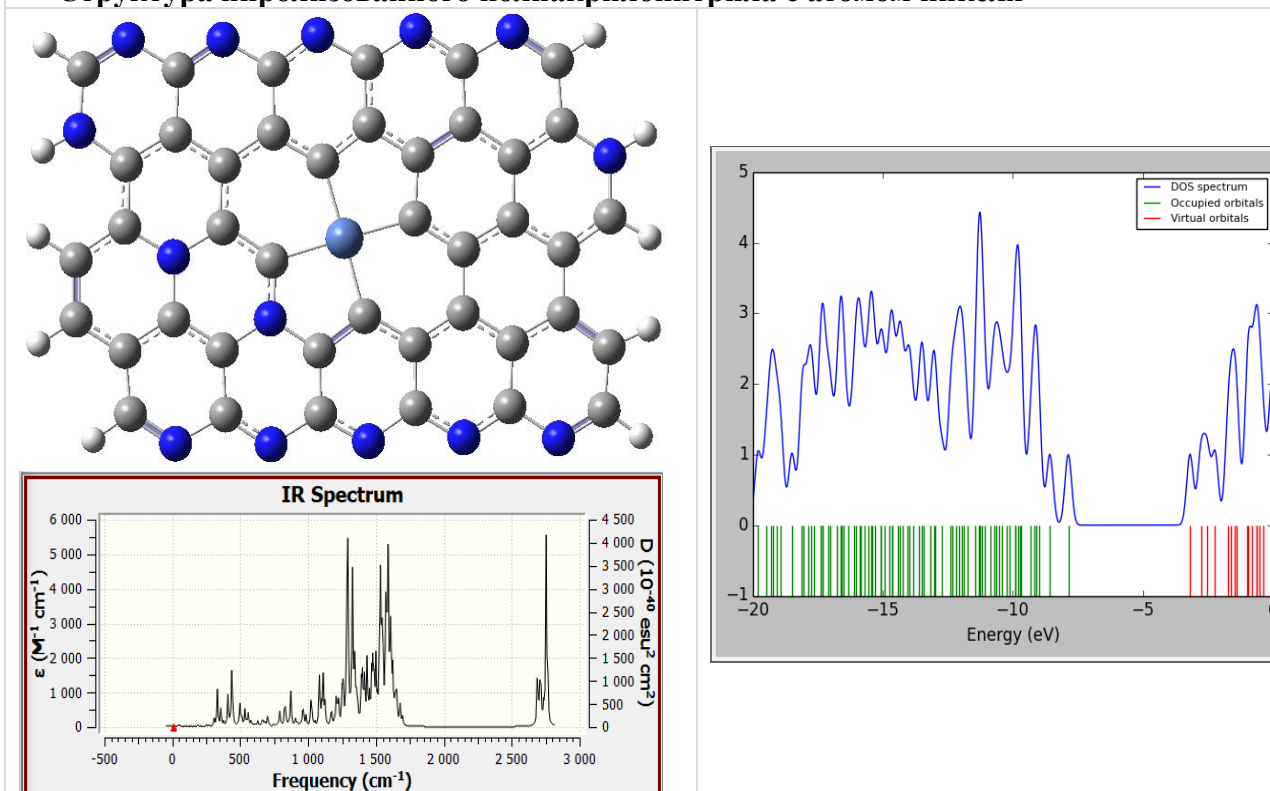
мещать исследуемые атомы металла. Вычисления проводились в рамках молекулярного кластера расчетной схемой РМБ. Полная оптимизация энергии позволила определить геометрические особенности нанокompозита, установить влияние примесного атома на значение запрещенной зоны, увидеть различие в плотности состояния. Выполненные расчеты показали, что внедрение атома металла в дефектную структуру полимера приводит к изменению ширины запрещенной зоны. Ширина запрещенной зоны нанокompозита уменьшается, также можно увидеть и изменения в ИК-спектре. Все рассчитанные характеристики представлены в таблице 1.

Таблица 1. Основные характеристики нанокompозита на основе пиролизованного полиакрилонитрила с атомами никеля и меди.

Геометрическая структура и ИК -спектр	Энергетические спектры и плотность состояния
<b>Структура пиролизованного полиакрилонитрила с вакансией</b>	
	
<b>Структура иролизованного полиакрилонитрила с атомом меди</b>	



Структура пиролизованного полиакрилонитрила с атомом никеля



**Заключение:** добавление наночастиц к материалу может значительно изменить его структуру и свойства. Влияние наночастиц на структуру материала сильно зависит от взаимодействия между наночастицами и окружающей матрицей. Введение

наночастиц может привести к изменению микроструктуры, кристаллической структуры, термической стабильности и механических свойств материала. Использование наночастиц в материаловедении открыло новые возможности для разработки пе-

редовых материалов с заданными свойствами. Потенциальные применения наночастиц в материаловедении многочисленны. Например, добавление наночастиц к металлам может повысить их прочность и пластичность, что приведет к разработке легких и высокопрочных материалов для использования в аэрокосмической и авто-

мобильной промышленности. Точно так же включение наночастиц в полимеры может улучшить их механические, термические и электрические свойства, что приведет к разработке передовых композитов для использования в электронной, медицинской и энергетической отраслях.

#### Библиографический список

1. Давлетова, О. А. Структура и электронные характеристики пиролизованного полиакрилонитрила: специальность 05.27.01 «Твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и наноэлектроника, приборы на квантовых эффектах»: диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук / Давлетова Олеся Александровна. – Волгоград, 2010. – 140 с.

2. On the mechanism of pore formation in pyrolyzed polyacrylonitrile / O. A. Kakorina, I. V. Zaporotskova, L. V. Kozhitov, A. V. Popkova // Journal of Physics: Conference Series, Saint Petersburg, 14-16 мая 2019 года. Vol. 1281. – Saint Petersburg: Institute of Physics Publishing, 2019. – P. 012031. – DOI 10.1088/1742-6596/1281/1/012031.

3. Кузнецов, М. В. Физико-химические закономерности адсорбции некоторых органических соединений наночастицами меди / М. В. Кузнецов // Актуальные вопросы естествознания: СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ VII Всероссийской научно-практической конференции, Иваново, 31 марта 2022 года. – Иваново, 2022. – С. 98-103.

4. Сафина, Л. Р. влияние количества атомов металла на механические свойства композита никель/скомканый графен / Л. Р. Сафина, К. А. Крылова, Ю. А. Баимова // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2022. – Т. 19, № 2. – С. 213-220. – DOI 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.02.009.

### EFFECT OF NICKEL AND COPPER ATOMS ON THE PROPERTIES AND STRUCTURE OF PYROLYZED POLYACRYLONITRILE

**A.N. Panchenko**, *Student*  
**Volgograd State University**  
 (Russia, Volgograd)

**Abstract.** *This article discusses the effect of nanoparticles on the structure of materials. It explains how nanoparticles can be incorporated into a material and how this can affect the physical, chemical and mechanical properties of the material. The polymer - pyrolyzed polyacrylonitrile, in the structure of which an atom of copper or nickel is introduced, is considered in detail. The calculations were performed by the semi-empirical PM6 method. The IR spectra and the band gap are calculated, and the densities of states are plotted.*

**Keywords:** *pyrolyzed polyacrylonitrile, band gap, nickel, copper, nanoparticles.*