

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СОСТАВА СЛЕДОВ ПРОДУКТОВ ВЫСТРЕЛА С ПОМОЩЬЮ НАНОСТРУКТУР

А.Н. Панченко, студент

Волгоградский государственный университет
(Россия, г. Волгоград)

DOI: 10.24412/2500-1000-2023-4-4-186-189

Аннотация. В настоящей работе при помощи полуэмпирической схемы MNDO проведены теоретические исследования сорбционных способностей дифениламина и 2-нитродифениламина, входящих в состав следов продуктов выстрела на внешней поверхности углеродных нанотрубок (УНТ). Получены следующие результаты: исследован механизм адсорбции дифениламина и 2-нитродифениламина на УНТ; установлено влияние адсорбирующихся молекул на проводящие свойства УНТ.

Ключевые слова: углеродные нанотрубки, давность выстрела, дифениламина, 2-нитродифениламин.

В мире судебно-медицинской экспертизы идентификация следов и назначение выстрела может быть важным шагом в раскрытии преступления. Давность выстрела в настоящее время устанавливается по следам выстрела лишь ориентировочно. Этот факт обуславливает необходимость разработки научно обоснованного подхода к его оценке.

Бесспорным признаком недавнего выстрела является запах порохового дыма, который можно ощущать у дульного среза, патронника и от стреляной гильзы. Этот запах является нестойким и быстро исчезает, но при наличии благоприятных условий может продержаться сутки и более. Сразу после выстрела канал ствола покрывается налетом интенсивно черного цвета (от дымного пороха) и слабого серого цвета (от бездымного пороха). Затем, если не производилось чистки оружия, в зависимости от содержания влаги в воздухе на поверхности канала появляются капельки влаги, островки ржавчины и, наконец, поверхность канала ствола покрывается сплошным налетом ржавчины, которая тоже имеет характерный запах [1-2].

Также давность выстрела можно определить по существующей зависимости между возрастом органических продуктов выстрела (дифениламина), отлагающихся

на внутренней поверхности канала ствола огнестрельного оружия, и их химическим составом, изменяющимся с течением времени (дифениламин = 2-нитродифениламин): чем больше давность выстрела, тем больше обнаруживаются продукты нитрования ДФА окислами азота (2-нитродифениламина), сорбированными на внутренней поверхности канала ствола огнестрельного оружия или около пулевого отверстия, и наоборот. Если во внутреннем канале оружия собрать пробу для исследования не составляет труда, то изъять данные вещества с поверхности, на которой присутствует пулевое отверстие проблематично, ввиду очень малого количества [3]. Поэтому необходимо разработать методику, которая позволит собирать следы выстрела вокруг пулевого отверстия.

Для проведения теоретических расчетов взаимодействия углеродных нанотрубок [4] с молекулой дифениламина и 2-нитродифениламина необходимо было построить и выбрать оптимальную модель молекул. Для определения оптимальной структуры были выполнены расчеты геометрии системы с использованием полуэмпирического метода MNDO в программном пакете Gaussian. Результаты расчетов представлены на рисунке 1.

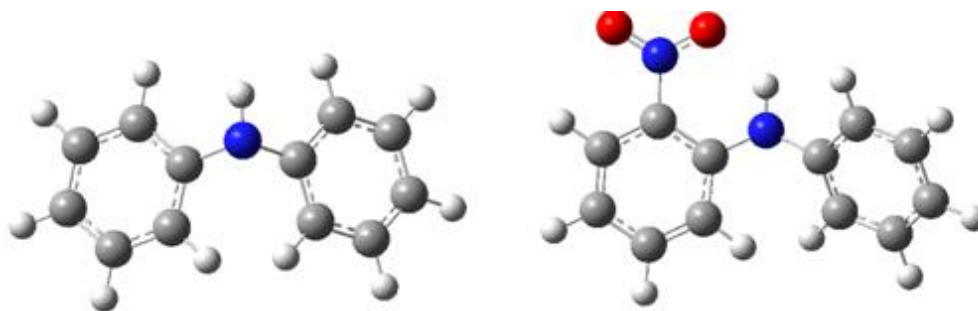


Рис. 1. Молекула дифениламина (C_6H_5)₂NH и 2-нитродифениламин $C_{12}H_{10}N_2O_2$.

Далее исследовался процесс адсорбции выбранных структур на углеродной нанотрубке (6,6). Рассматривалось два положе-

ние ориентации молекулы дифениламина и 2-нитродифениламин над поверхностью углеродного тубулена (рис. 2).

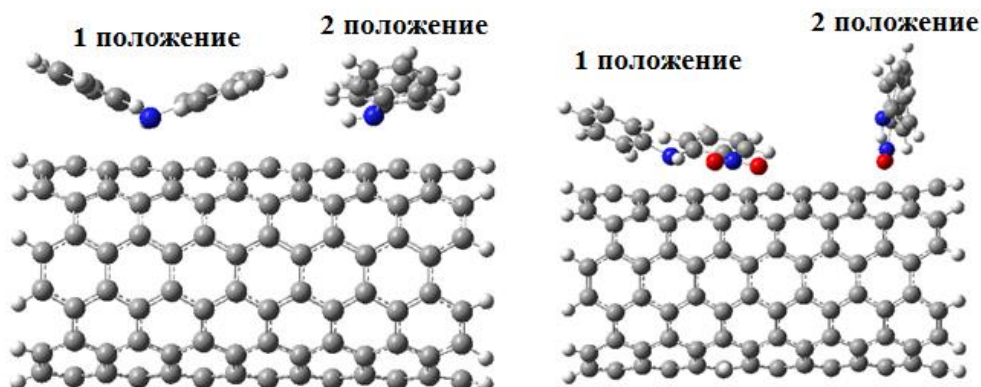


Рис. 2. Две ориентации молекулы дифениламина и 2-нитродифениламина над поверхностью углеродного тубулена (6,6)

Молекулы приближались к поверхности УНТ, в каждой точке (шаг 0,1 Å) была рассчитана энергия взаимодействия, которая представлена на рисунке 3.

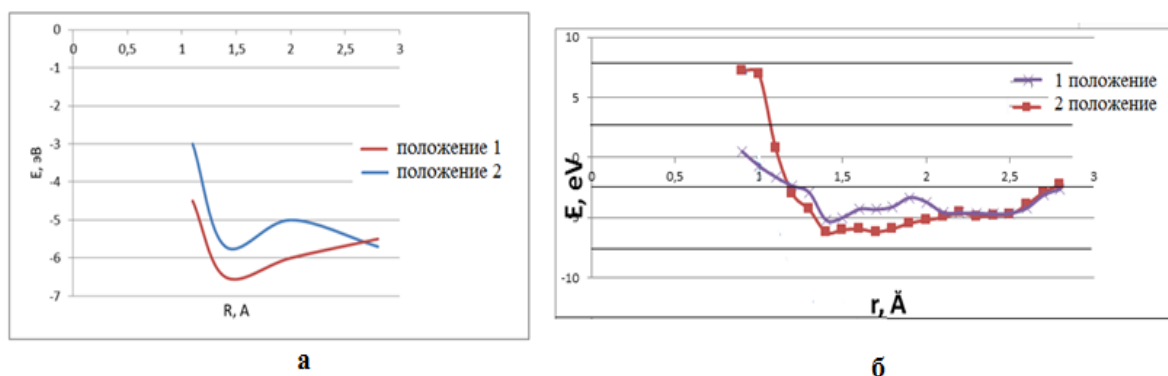


Рис. 3. Энергии взаимодействия с углеродной нанотрубкой (6,6): а) молекулы дифениламина; б) молекулы 2-нитродифениламина

Анализ энергетических кривых установил, что молекулы адсорбируются на поверхности трубки, что подтверждается наличием минимума на энергетических кривых. Обнаружено, что процесс адсорбции зависит от первоначального располо-

жение молекулы дифениламина над поверхностью трубки: в первом случае процесс происходит безбарьерно, во втором случае молекуле необходимо преодолеть небольшой барьер величиной 0,65 эВ. Оптимизация структурных параметров ком-

плекса «УНТ-молекула дифениламина» позволила установить пространственную ориентацию комплекса и установить гео-

метрические особенности образовавшейся структуры (рис. 4).

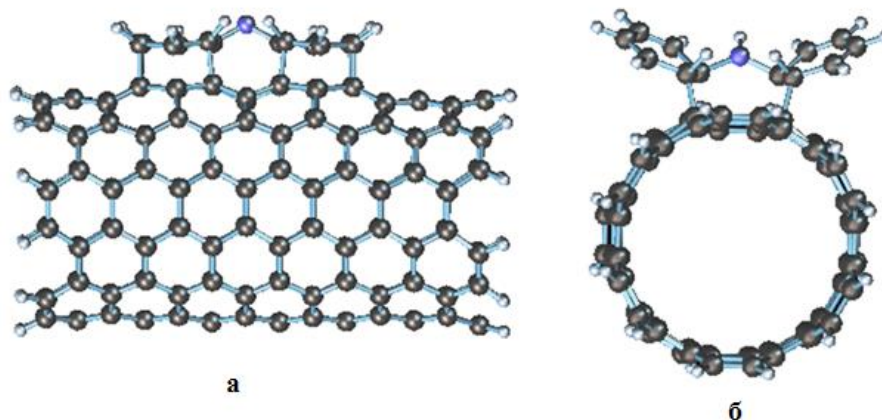


Рис. 4. Взаимодействие дифениламина с УНТ (6,6):

а) молекула взаимодействует с УНТ в положении 1; б) молекула взаимодействует с УНТ в положении 2.

Структурная единица 2-нитродефиниламина также адсорбируется на поверхности трубки, что подтверждается наличием минимума на энергетических кривых, иллюстрирующего факт образования химической связи между атомом структурной единицы и атомом трубки. Реализуется так называемая химическая адсорбция, расстояния адсорбции состави-

ло 1,45 Å для параллельной ориентации и 1,39 Å для перпендикулярной ориентации (рис. 5). Следует отметить, что для образования адсорбционного комплекса в случае параллельного расположения молекулы, ей необходимо преодолеть потенциальный барьер высотой около 1,5 эВ. Для перпендикулярной ориентации процесс адсорбции происходит безбарьерно.

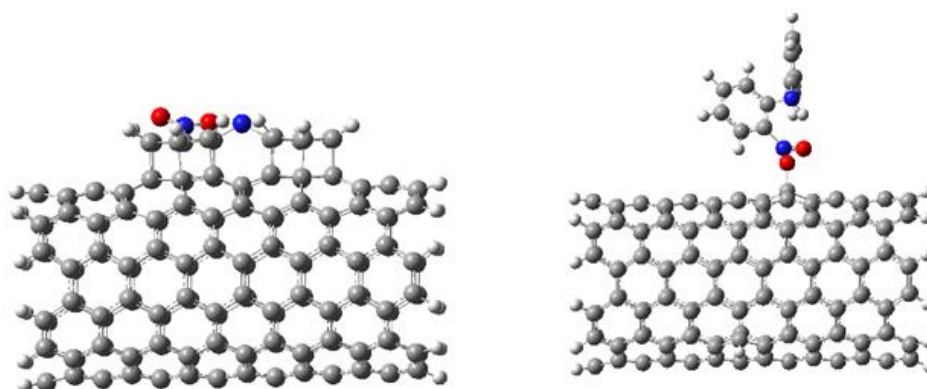


Рис. 5. Адсорбция молекулы 2-нитродефиниламина на поверхности УНТ (6,6)

Далее необходимо выяснить как изменяются свойства углеродного тубулена при образовании различных адсорбционных комплексов: «УНТ+дифениламин» и «УНТ+2-нитродифениламин».

Расчеты позволили построить одноэлектронные спектры. Обработка результатов расчетов электронного строения углеродного тубулена и адсорбционного комплекса

на его основе определила, что уровни молекулярных орбиталей объединяются в зоны (рис. 6). Следует заметить, что образовавшиеся адсорбционные комплексы обладают различными электронно-энергетическими характеристиками по сравнению с чистой тубулярной структурой. Это проявляется в изменении ширины запрещенной зоны (запрещенная зона уве-

личивается при адсорбции веществ входящих в состав пороха на поверхности УНТ). Данный факт как раз и позволит опреде-

лить концентрацию этих веществ, что позволит сделать вывод о давности произведенного выстрела.

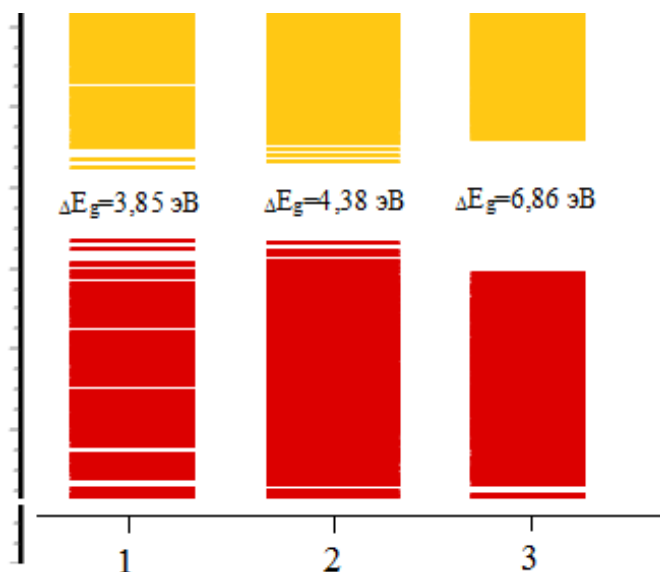


Рис. 6. Одноэлектронные энергетические спектры: 1-УНТ; 2- УНТ + дифениламин; 3- УНТ+2-нитродифениламин

Библиографический список

1. Дильдин Ю.М. Основы криминалистического исследования самодельных взрывных устройств. – М., 1991.
2. Михайлов Л.Е. Криминалистическое исследование охотничьего огнестрельного оружия. – Киев, 1987.
3. Патент № 2287813 С1 Российская Федерация, МПК G01N 33/00, G01N 33/22. Способ определения давности выстрела и устройство для его осуществления: № 2005133255/02: заявл. 31.10.2005; опубл. 20.11.2006 / Л.В. Бачурин, В.С. Гуляев, А.В. Ладонин [и др.].
4. Дьячкова Т.П. Методы функционализации и модифицирования углеродных нанотрубок / Т.П. Дьячкова, А.Г. Ткачев – М.: Издательский дом «Спектр», 2013. – 152 с.

THEORETICAL STUDIES OF THE COMPOSITION OF TRACES OF SHOT PRODUCTS USING NANOSTRUCTURES

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

Abstract. In this work, using the semi-empirical MNDO scheme, theoretical studies of the sorption abilities of diphenylamine and 2-nitrodiphenylamine, which are part of the traces of shot products on the outer surface of carbon nanotubes (CNTs), were carried out. The following results were obtained: the mechanism of adsorption of diphenylamine and 2-nitrodiphenylamine to CNTs was investigated; the effect of adsorbable molecules on the conductive properties of CNTs has been established.

Keywords: carbon nanotubes, prescription shot, diphenylamine, 2-nitrodiphenylamine.