

ВНЕДРЕНИЕ АТОМА КОБАЛЬТА В СТРУКТУРУ ПИРОЛИЗОВАННОГО ПОЛИАКРИЛОНИТРИЛА

И.А. Какорин, студент

Волгоградский государственный университет
(Россия, г. Волгоград)

DOI: 10.24412/2500-1000-2023-6-4-104-107

Аннотация. В работе изучено внедрение атома кобальта в структурную матрицу пиролизованного полиакрилонитрила. Установлено наиболее стабильное расположения внедренных атомов в полимере. Основные расчеты для изучения структуры и свойств ППАН с атомом кобальта проводились с помощью метода DFT.

Ключевые слова: пиролизированный полиакрилонитрил, полимерная матрица, атом кобальта, метод DFT, металлополимерный композит.

Полимеры являются неотъемлемой частью современного общества и стали повсеместными в нашей повседневной жизни. От одежды, которую мы носим, до еды, которую мы едим, полимеры играют важную роль практически во всем, что мы делаем. Это универсальные материалы, которые можно использовать в различных областях, что делает их важным компонентом современной промышленности. Полимеры – это макромолекулы, состоящие из повторяющихся звеньев, называемых мономерами. Это большие молекулы, которые могут состоять из тысяч или даже миллионов мономеров. Эта уникальная структура придает полимерам ряд свойств, делающих их полезными во многих областях. Например, полимеры могут быть твердыми и жесткими, как пластик, или мягкими и гибкими, как резина. Они также могут быть устойчивы к теплу, химическим веществам и воде, что делает их идеальными для использования в различных отраслях промышленности. Однако последнее время пользуются спросом и повышенным интересом металлоуглеродные нанокompозиты. Нанокompозиты металл-углерод представляют собой гибридные материалы, состоящие как из металлических, так и из углеродных компонентов. Эти материалы привлекли значительное внимание благодаря своим уникальным механическим, электрическим и термическим свойствам, что делает их пригодными для различных применений в различ-

ных областях, от энергетики до нанoeлектроники.

Интеграция металлов с материалами на основе углерода, такими как углеродные нанотрубки (УНТ) и графен, привела к созданию нанокompозитов металл-углерод с превосходными свойствами по сравнению с их отдельными составляющими. Связь между металлическими и углеродными компонентами позволяет повысить механическую прочность, электропроводность и термическую стабильность. Для получения новых структур сейчас рассматривают полимеры, которые в своем составе имеют углерод и уникальную структуру, которая способна объединить и удержать металлические атомы.

Среди полимеров наиболее перспективным является пиролизированный полиакрилонитрил, благодаря своим уникальным электронным и физико-химическим свойствам [1-5].

Для изучения геометрических параметров и расчета электронно-энергетических свойств нанокompозита на основе ППАН была предложена структура монослоя пиролизованного полиакрилонитрила с вакансионными дефектами, в центре которого располагался атом кобальта. Рассматривалось два вида дефекта: 1) в структуре отсутствовал один атом полимера; 2) в структуре отсутствовало два атома полимера (рис. 1). Вакансионный дефект смоделирован

примерно в середине слоя, чтобы ослабить

влияние краевых эффектов.

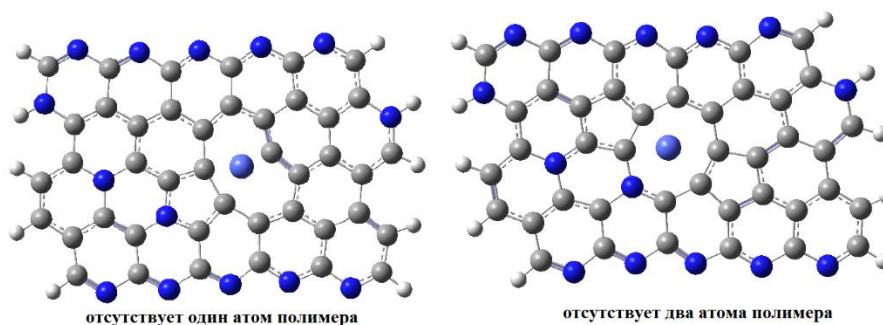


Рис. 1. Расположение атома кобальта в матрице ППАН

Проведенные расчеты оптимизации геометрии системы «ППАН + атом Co» позволили получить пространственную конфигурацию кластера нанокompозита.

По представленным результатам было обнаружено, что плоскость монослоя ППАН искривилась незначительно (рис. 2).

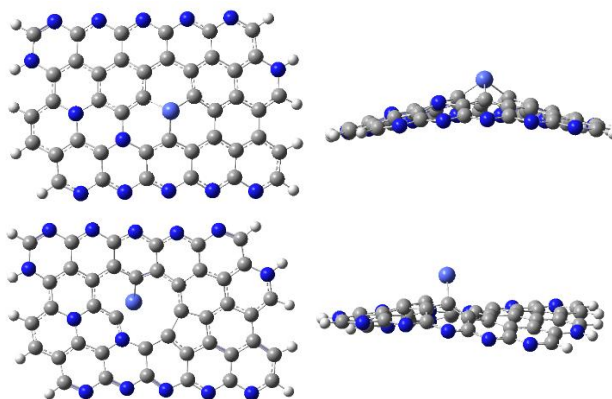


Рис. 2. Полимерная матрица ППАН с атомом кобальта

После полной оптимизации системы были образованы новые гексагональные связи между атомом кобальта и прилежа-

щих к нему атомов полимера. Длины связей показаны на рисунке 3.

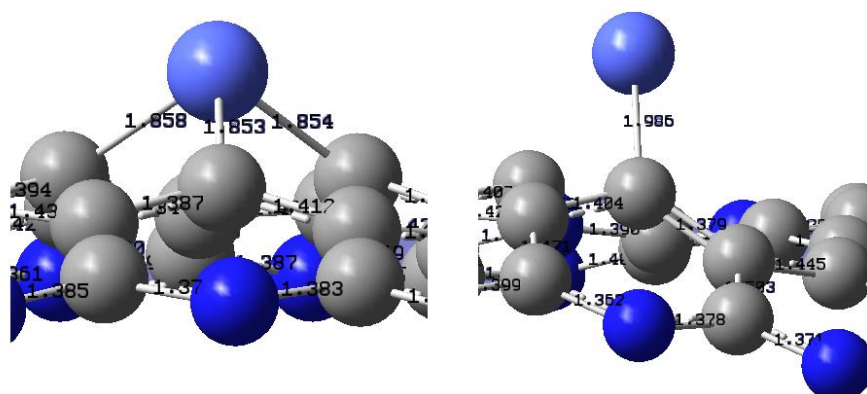


Рис. 3. Приведенные данные о длинах связи после оптимизации

Была рассчитана ширина запрещенной зоны, построены одноэлектронные спектры (рис. 4) и зарядовое распределение. Распределение заряда показало, что атом, а

содержит главный положительный электрический заряд системы, а соседние атомы отрицательный заряд (рис. 5).

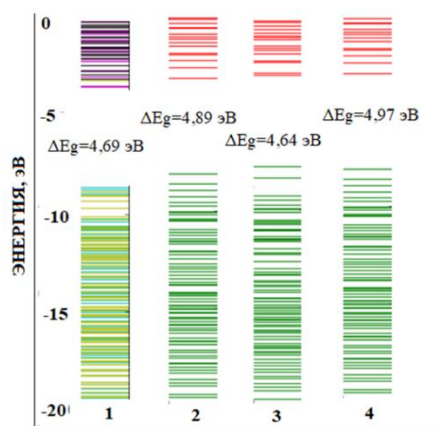


Рис. 5. Одноэлектронные энергетические спектры

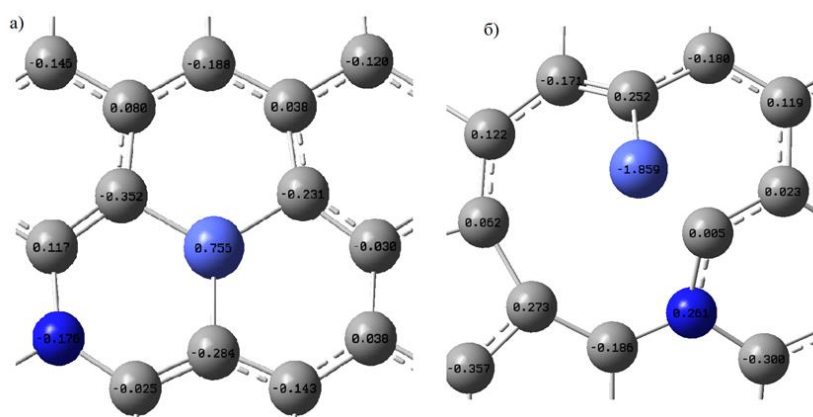


Рис. 4. Зарядовое распределение атомов металла в монослое ППАН

Это является следствием взаимосвязи между металлами и системой сопряженных связей в ППАН. Образовавшиеся комплексы в структуре вызывают смещение электронных облаков металла на двойные связи углерод-углерод. При этом происходит поляризация соседних атомов окружения атома кобальта. Таким образом, данную металлополимерную единицу можно считать первым приближением для дальнейшего исследования образования

металлических нанокластеров на основе ППАН.

Заключение. Выполненные DFT расчеты монослоя ППАН, в структуре которого был встроен атом кобальта, позволяют утверждать, что запутанная структура данного полимера позволит на ее основе получить новый металлополимерный нанокомпозит. При этом контролируя концентрацию внедренного кобальта позволит контролируемо менять свойства нового материала.

Библиографический список

1. Какорина О.А. Металлоуглеродные наноконкомпозиты на основе пиролизованного полиакрилонитрила с внедренными в межслоевое пространство атомами щелочноземельных металлов / О.А. Какорина, И.В. Запороцкова, Л.В. Кожитов // В сборнике: Физика и технология наноматериалов и структур Сборник научных статей 3-й Международной научно-практической конференции. В 2-х томах. – 2017. – С. 225-231.
2. Kakorina O.A. Simulation of pyrolysed polyacrylonitrile based composite with amorphising boron additives / O.A. Kakorina, I.V. Zaporotskova, I.A. Kakorin, L.V. Kozhitov // Journal of Physics: Conference Series. Applied Mathematics, Computational Science and Mechanics: Current Problems. – 2020. – С. 012131.

3. Pyrolyzed polyacrylonitrile based composite with amorphizing silicon additives / O. Kakorina, I. Zaporotskova, I. Kakorin, T. Ermakova, L. Kozhitov // В сборнике: Moscow Workshop on Electronic and Networking Technologies, MWENT 2020 - Proceedings. – 2020. – С. 9067360.

4. Anikeev N.A. Theoretical studies of the structure of the metal – carbon composites on the base of acryle – nitrile nanopolimer / N.A. Anikeev, I.V. Zaporotskova, L.V. Kojitov, O.A. Davletova, A.V. Popkova // Journal of nano and electronic physics. – 2014. – Vol. 6. – № 3. – P. 03035-03036.

5. Помогайло, А.Д. Наночастицы металлов в полимерах / А.Д. Помогайло, А.С. Розенберг, И.Е. Уфлянд. – М.: Химия, 2000. – 672 с.

INTRODUCTION OF THE COBALT ATOM INTO THE STRUCTURE OF PYROLYZED POLYACRYLONITRILE

I.A. Kakorin, *Student*
Volgograd State University
(Russia, Volgograd)

Abstract. *The paper studies the introduction of cobalt atoms into the polymer matrix of pyrolyzed polyacrylonitrile. The most stable arrangement of embedded atoms in the polymer was established. The main calculations for the study of the structure and properties of PPAN with cobalt atoms were carried out using the DFT method.*

Keywords: *pyrolyzed polyacrylonitrile, polymer matrix, cobalt atom, DFT method, metal-polymer composite.*