

ОДИННАДЦАТАЯ МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

УГЛЕРОД:

ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ НАУКИ,
МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ, ТЕХНОЛОГИЯ

СБОРНИК ТЕЗИСОВ ДОКЛАДОВ



Москва, г. Троицк, Октябрьский проспект, д. 12

Одиннадцатая Международная конференция
«Углерод: фундаментальные проблемы науки,
материаловедение, технология»

СБОРНИК ТЕЗИСОВ ДОКЛАДОВ

Москва, г. Троицк, Октябрьский проспект, д. 12

<u>Шилева Е.А.</u> , Новаковская Ю.В. АНАЛИЗ ТЕОРЕТИЧЕСКИХ ИК-СПЕКТРОВ ОКСИДА ГРАФИТА	537
<u>Шипилов А.Б.</u> , Сорокин Б.П., Квапшин Г.М., Новосёлов А.С. ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ АКУСТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ И МОДУЛЕЙ УПРУГОСТИ СИНТЕТИЧЕСКОГО АЛМАЗА В ИНТЕРВАЛЕ 4–400 К	538
<u>Школин А.В.</u> , Фомкин А.А., Яковлев В.Ю., Меньшиков И.Е. СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ НАНОПОРИСТЫЕ УГЛЕРОДНЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ МАССИВОВ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК, КООРДИНИРОВАННЫХ ЦИКЛИЧЕСКИМИ УГЛЕВОДОРОДАМИ, ДЛЯ АДСОРБЦИИ МЕТАНА И ВОДОРОДА	541
Шульга Ю.М. ПЕЧАТНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ДЛЯ СУПЕРКОНДЕНСАТОРОВ (ОДНО ИЗ ПРИМЕНЕНИЙ ГРАФЕНОПОДОБНЫХ МАТЕРИАЛОВ)	544
Шумакова А.Н. ВИБРАЦИОННАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ	546
Шумилова Т.Г. РАЗНОВИДНОСТИ ИМПАКТНЫХ АЛМАЗОВ И МЕХАНИЗМЫ ИХ ОБРАЗОВАНИЯ	548
<u>Юдина Т.Ф.</u> , Братков И.В., Мельников А.Г., Братков А.В. ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА СФЕРОИДИЗАЦИИ ПРИРОДНЫХ ГРАФИТОВ	550
АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ	553

АНАЛИЗ ТЕОРЕТИЧЕСКИХ ИК-СПЕКТРОВ ОКСИДА ГРАФИТА

Шильева Е.А., Новаковская Ю.В.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва

liza.shilyaeva@yandex.ru

Оксид графита является материалом с нерегулярной структурой, зависящей от условий синтеза. Было обнаружено [1], что мембраны, полученные на основе оксида графита, обладают уникальными свойствами – способностью не пропускать газы, такие как азот, водород, углекислый газ. Однако в присутствии воды, пропускная способность мембраны для вышеупомянутых газов увеличивается. На этот процесс оказывает влияние внутреннее строение мембраны и исходного оксида графита. Экспериментальное исследование оксида графита дает нам информацию преимущественно о видах групп и брутто составе. Однако этого недостаточно для глубокого понимания сорбционных свойств оксида графита, построения моделей работы мембраны на основе оксида графита. Компьютерное моделирование может позволить проанализировать вероятные локальные структурные фрагменты оксида графита.

В данной работе был экспериментально исследован оксид графита, синтезированный по методу Тура [2], и мембрана из оксида графита, полученная методом фильтрации [3]. Для исследуемых материалов были получены следующие данные: атомный состав поверхности (РФЭС), микрофотографии (СЭМ), дифрактограммы (РФА) и ИК-спектры, что в совокупности позволило сделать предварительные выводы о возможном наличии определенных кислород-содержащих групп на поверхности и их относительном количестве. Однако, сложность однозначного отнесения пиков ИК-спектра, обусловленная перекрытием диапазонов характеристических колебаний различных структурных фрагментов, включая разные участки углеродного каркаса, потребовала использования расчетных данных. Нами было выполнено квантовохимическое моделирование систем $C_nO_mH_kS_lN_j$ ($n = 24\div54$; $m = 3\div15$; $k = 0\div20$; $l = 0\div2$; $j = 0\div2$), включавших разное число следующих функциональных групп в различных сочетаниях: карбоксильных, карбонильных, гидроксильных, сульфогрупп, нитрогрупп. Расчеты были выполнены в приближении функционала плотности с гибридным обменно-корреляционным функционалом B3LYP и расширенным двухэкспонентным базисом гауссова типа (DFT-B3LYP/6-31G(d,p)). Анализ нормальных колебаний модельных фрагментов оксида графита позволил построить теоретические колебательные спектры, а их сопоставление с экспериментальными, в том числе и зарегистрированными другими исследователями, позволило предложить несколько наиболее вероятных вариантов расположения функциональных групп в структурных фрагментах оксида графита, а также возможные пути реакции окисления графита. Расчеты выполнены с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса МГУ имени М.В. Ломоносова.

ЛИТЕРАТУРА

1. Nair R.R., Wu H.A., Jayaram P.N. et al. Science. 2012. V. 335. P. 442–444.
2. Marcano D.C., Kosynkin D.V., Berlin J.M. et al. ACS Nano. 2010. V. 4. P. 4806–4814.
3. You S., Luzan S.M., Szabo T. et al. Carbon. 2013. V. 52. P. 171–180.