

ISSN 2305-7815

№ 1 (8)

2013



ВЕСТНИК

ВОЛГОГРАДСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
УНИВЕРСИТЕТА

Серия 10

ИННОВАЦИОННАЯ ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ



УДК 538.975
ББК 22.3

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ФТОРИРОВАНИЯ И СУЛЬФИДИРОВАНИЯ ПИРОЛИЗОВАННОГО ПОЛИАКРИЛОНИТРИЛА¹

О.А. Давлетова, И.В. Запорожкова, Т.Ф. Панченко

В данной статье представлены результаты расчетов сорбционных свойств пиролизованного полиакрилонитрила в отношении фтора и серы, выполненные в рамках модели молекулярного кластера с помощью полуэмпирической схемы MNDO. Выполненные исследования показали возможность адсорбции атомов фтора и серы на поверхности пиролизованного полиакрилонитрила. Обнаружено, что двухслойная структура ППАН является более эффективным адсорбентом для атома серы по сравнению с монослоем.

Ключевые слова: пиролизованный полиакрилонитрил, допирование, адсорбция, сульфидирование, фторирование.

Материалы, которые использует человек в своей деятельности, всегда играли важную, а часто и определяющую роль в прогрессе цивилизации. В настоящее время широчайшее распространение получили полимерные материалы, которые используются практически во всех областях техники и быта. Ученые синтезируют новые виды полимеров и получают модификации уже известных. Основным направлением исследований в этой области является развитие теоретических основ для получения и изучения структуры и свойств новых композиционных полимерных материалов. Полиакрилонитрил является наиболее интересным в связи с возможными областями применения и широко распространенным полимером. Для модифицирования его химических свойств и получения его нанообразований используют механизм самоорганизации структуры при взаимодействии ИК-излучения с полимером. В результате был получен так называемый пиролизованный полиакрилонитрил (ППАН) [6]. Ранее нами была исследована сорбционная активность ППАН в отношении легких атомов газовой фазы [2; 4]. В данной статье представлены результаты расчетов сорбционных

свойств пиролизованного полиакрилонитрила в отношении фтора и серы, выполненные в рамках модели молекулярного кластера (МК) с помощью полуэмпирической схемы MNDO [7; 8].

В качестве объекта исследования был выбран монослой ППАН, содержащий, помимо углерода, 20 % атомов азота (от общего числа атомов). Расстояние между атомами в слое составляет 1.4 Å. Рассмотрены три варианта ориентации адсорбирующихся атомов на поверхности монослоя полимера: 1) над атомом углерода; 2) над центром связи C – C; 3) над центром углеродного гексагона [1]. Процесс адсорбции моделировался пошаговым приближением адсорбирующихся атомов к поверхности ППАН. Геометрия системы оптимизировалась на каждом шаге. Выполненные расчеты установили возможность адсорбции атомов фтора на монослой ППАН [3; 5; 9].

Рассмотрим подробнее адсорбцию атома фтора над атомом углерода гексагона, в котором присутствует один атом азота. Анализ результатов показывает, что энергетическая кривая взаимодействия слоя полимера и атома фтора имеет один минимум на расстоянии $R = 1.5 \text{ \AA}$. Для того чтобы оказаться в точке минимум, атом F должен преодолеть потенциальный барьер E_p , отождествляемый с энергией активации, равный 0.9 эВ. Энергия адсорбции в