

4. Khutoryanskiy V.V. and Staikos G. (editors) Hydrogen-bonded interpolymer complexes. Formation, structure and applications. World Scientific, ISBN 978-981-270-785-7. – 2009. – 376 p.

5. Ikawa T., Abe K., Honda K., Tsuchida E. Interpolymer complex between poly(ethylene oxide) and poly(carboxylic acid) // J. Polym. Sci.: Polym. Chem. Ed.- 1975.- V.13, № 7 - P.1505-1514.

6. Baranovsky V., Petrova T., Rashkov I. Complex formation between poly(methacrylic acid) and poly(propylene glycol) in aqueous solutions // Eur. Polym. J. - 1991. - V.27. - P. 1045.

7. Nurkeeva Z. S., Mun G. A., Khutoryanskiy V. V. Interpolymer Complexes of Poly(glycol vinyl ethers) and Related Composite Materials (Review)// Polymer Sci. - 2001.Т.43Б, №3. - С.146-155.

## КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ КИСЛОТНО-ОСНОВНОЕ ЗОНДИРОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ УГЛЕРОДНЫХ НАНОКЛАСТЕРОВ

Масалимов А.С., Рахимжанова А.С., Туктыбаева А.Е., Никольский С.Н.  
Карагандинский университет имени Е.А.Букетова, Республика Казахстан

Квантово-химическая лицензионная программа “Gaussian-2016” (USA) позволяет производить ab-initio расчеты углеродных нанокластеров в ограниченном Хартри-Фоковском приближении ROHF [1,2]. В таблице 1 приведены, полученные нами указанным методом с использованием орбитального базиса 3-21G, величины адиабатических потенциалов ионизации (ПИ-а) и сродства к электрону (СЭ) известных фуллеренов и нанотрубок и для сравнения представлены рассчитанные параметры некоторых органических электроноакцепторов.

Таблица 1. Величины адиабатических потенциалов ионизации и сродства к электрону молекул, рассчитанные в приближении (ROHF) с применением орбитального базиса 3-21G.

№ п/п	Окислитель	ПИ-а, эВ	СЭ, эВ
1	Бензол	-8,254161536	-3,249330496
2	Нафталин	-7,253821204	-2,023429896
3	Антрацен	-6,487721768	-1,14589732
4	Фенантрен	-7,057785956	-1,806631892
5	Пирен	-6,62380898	-1,282447136
6	Бензпирен	-6,25780758	-0,881777648
7	Коронен	-6,716220932	-1,292597212
8	Фуллерен-20	-6,47944932	1,749840448
9	Фуллерен-24	-7,513586956	1,769433088
10	Фуллерен-28	-7,589862192	2,061826028

11	Фуллерен-30	-6,959496212	1,88347858
12	Фуллерен-50	-7,347131152	2,168986884
13	Фуллерен-60	-7,859888342	0,938329439
14	Фуллерен-70	-7,760024491	1,136029877
15	Нанотрубка-33	-5,666987800	0,619088390
16	Нанотрубка-55	-5,031628930	1,277326110

Из указанных расчетных данных таблицы 1 видно, что если процесс одноэлектронной ионизации органических молекул и углеродных нанокластеров является эндотермическим, то присоединение электрона к фуллеренам и нанотрубкам, со внешними диаметрами 3,3 и 5,5 нанометров происходит экзотермически. Другими словами, углеродные нанокластеры являются более сильными окислителями, чем даже бензпирен, известный своей агрессивной канцерогенностью.

Таблица 2 Малликеновские заряды металлических катионов в эндоэдральных солях фуллерена, рассчитанные методом ROHF в базисе 3-21G

№ п/п	Атом	Конфигурация	Заряд
1	Водород	1s <sup>1</sup>	+0.001053
2	Литий	2s <sup>1</sup>	+1.297390
3	Углерод	2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup>	+ 0.006965
4	Калий	4s <sup>1</sup>	+1.395000
5	Кальций	4s <sup>2</sup>	+2.246211
6	Алюминий	3s <sup>2</sup> 3p <sup>1</sup>	+1.279493
7	Цинк	3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup>	+1.215991

В таблицах 2-3 представлены полученные нами компьютерными расчетами данные, которые показывают степени поляризации металлических катионов в неорганических солях фуллерена.

Следует отметить, что правильные симметрично сферические соли с фуллереном мы зарегистрировали квантово-химически только для данного нанокластера с атомами калия, алюминия и цинка. С атомами лития и кальция были получены несколько ассимметричные соли, в которых металлические атомы не попали в геометрический центр фуллерена и несколько сместились от него.

На примере атома калия показано, что в экзоэдральных комплексах калия с фуллереном C<sub>60</sub> атом металла поляризуется в меньшей степени чем в эндоэдральной структуре, а сближение атома кальция с π-электронной шестиугольной гранью нанокластера на реакционное расстояние затрудняется специфической геометрией ВЗМО образующегося комплекса [3,4].

Таблица 3 Величины атомных зарядов  $Q_M$  и расстояний  $R$  в экзоэдральных комплексах  $C_{60}$  с металлами

№ п/п	Атомы	Величины $Q_M$ в эндоэдральных $C_{60}$	Величины $Q_M$ в экзоэдральных $C_{60}$	$R$ , Å
1	Калий	1,395000	0,919912	2,99402
2	Кальций	2,246211	-0,006276	5,97646

Указанные факты позволяют заключить что приведенные углеродные нанокластеры, являясь сильными окислителями, уподобляются льюисовским кислотам. С этой точки представлялось интересным влияние сферического и цилиндрического электростатических полей фуллерена и нанотрубок на устойчивость линейного димера воды-комплекса за счет ординарной водородной связи, представленных на рисунках 1-3.

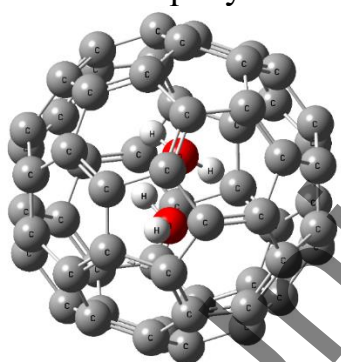


Рис.1. Внутрисферный комплекс  $C_{60}$  с молекулой воды, рассчитанный ab-initio методом RHF 3-21G

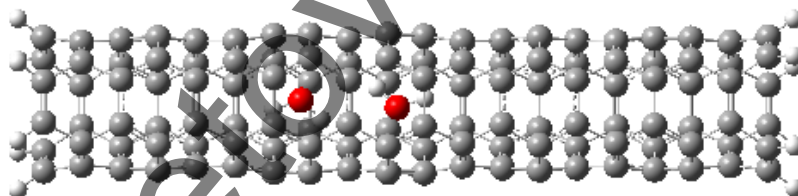


Рис.2. Линейный димер молекул воды, расположенный по центру цилиндрической оси нанокластера nt-33

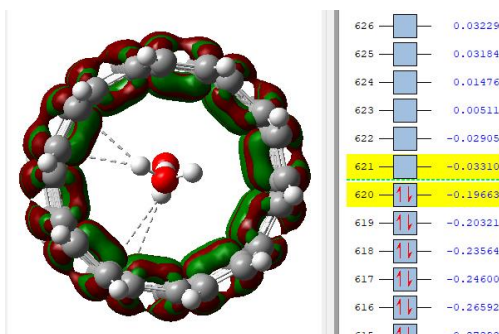


Рис.3. Пиктограмма ВЗМО и диаграмма заселенностей МО находящегося в полости nt-55 линейного димера воды

Отметим, что диссоциации димера воды на мономеры внутри фуллерена C<sub>70</sub> квантово-химически не регистрируется.

#### Литература

1. Foresman J.B., Frish A.E., Exploring chemistry with Electronic Structure Methods, Third Edition, Gaussian, Inc., Wallingford, CT USA. - 2015. p. 263.
2. Попов А.М., Вычислительные нанотехнологии, Кнорус, Москва. – 2014. - С. 122.
3. Суздальев И.П., Нанотехнология: Физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов, Москва, Комкнига. – 2006. -С. 282.
4. Меньшутина Н.В., Введение в нанотехнологию, Калуга, Издательство научной литературы Бочкаревой Н.Ф. – 2006. -С.114.

### **SYNTHESIS OF NANOSTRUCTURED COMPOUNDS BASED ON GRAPHENE OXIDE AND THEIR PRACTICAL APPLICATIONS IN VARIOUS FIELDS OF SCIENCE AND ECONOMY.**

Mustafin Ye.S., Muratbekova A.A., Borsynbaev A.S.  
Karaganda University of the name of academician E. A. Buketov, Karaganda,  
Kazakhstan, [edigemus@mail.ru](mailto:edigemus@mail.ru)

For its unique properties, graphene has become a universal material: in recent years it has gained significant attention from scientists in various fields, including the chemical industry. The two-dimensional sp<sup>2</sup>-hybridized layer of carbon atoms possesses a number of special electro-physical, thermal, optical, and mechanical properties. It also has a high specific surface area, mechanical strength, and low electrical resistance [1-2]. Graphene derivatives are widely used in various fields, including energy storage, nanoelectronic devices and batteries, biomedical applications, biosensors, cell visualization, drug delivery, and tissue engineering [3-5].

The practical application of graphene is based on the modification of bitumen binding additives used to obtain high-quality asphalt concrete. Graphene oxide is also introduced into bitumen emulsion as a reinforcing, adhesive, binding additive. It increases the surface adhesion properties for the gravel base of asphalt concrete. The identification of graphene oxide was carried out by 3D scanning laser Raman spectrometer. (ConfotecMR520) (Fig.1).