

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА АДсорбЦИИ ПРОДУКТОВ ВЫСТРЕЛА НА ПОВЕРХНОСТИ УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКИ

Ермакова Т.А.,^а Какорина О.А.,^а Назаренко А.К.,^а Васильев В.А.^б

^а Волгоградский государственный университет, 400062, Волгоград, пр. Университетский 100,
e-mail: taermakova09@mail.ru

^б Волгоградская академия МВД России, 400089, Россия, г. Волгоград, ул. Историческая, 130

В целях повышения качества диагностирования, установления определенного вида боеприпаса прорабатывается вопрос о возможности их маркирования. Нами был разработан способ маркировки пороха углеродными нанотрубками¹. В результате выстрела из веществ, входящих в состав порохов образуются разнообразнейшие агломераты, природа которых связана с возможным процессом адсорбции продуктов выстрела пороха на поверхности углеродных нанотрубок. Данные агломераты наблюдались при сканировании методом АСМ продуктов сгорания пороха и углеродного нанотрубного материала².

В работе изучен механизм адсорбции основных металлов, входящих в состав следов продуктов выстрела (атомов алюминия, свинца и сурьмы) на поверхности углеродных нанотрубок типа «arm-chair» (6,6), «chiral» (3,6) и «zig-zag» (0,10) с различными краевыми модификациями. Расчеты проводились в рамках модели молекулярного кластера с использованием полуэмпирической схемы РМЗ. Рассмотрены три варианта ориентации адатомов над поверхностью нанотрубулена: 1) над атомом углерода, 2) над центром связи С - С, 3) над центром углеродного гексагона. Процесс адсорбции моделировался пошаговым приближением адсорбирующихся атомов к поверхности тубулена. Выполненные расчеты позволили построить профили поверхности потенциальной энергии процессов адсорбции. Анализ энергетических кривых установил, что во всех случаях наблюдается физическая и химическая адсорбция данных атомов на поверхности тубуленов. Следует заметить, что для трубки «zig-zag» (0,10) предпочтительней физическая адсорбция рассматриваемых атомов.

Литература

1. Т.А. Ермакова, И.В. Запороцкова, И.В. Латышов, И.Б. Афанасьев, Ю.А. Дружинин, Т.Ю. Юдина. Патент RU 2625462, 2017.
2. И.Б. Афанасьев, Ю.А. Дружинин, Т.А. Ермакова, И. В. Запороцкова, И.В. Латышов. Использование модельных смесей содержащих углеродные нанотрубки, в криминалистических исследованиях, Вестн. Волгогр. гос. ун-та. Сер. 10, Иннов. деят. 2017. Т. 11. № 2. с.46-53