

Исследование надмолекулярной структуры нефтяных асфальтенов

© Шарипов^{1*} Талгат Ишмухамедович, Бахтизин¹ Рауф Загидович,
Доломатов^{1,2} Михаил Юрьевич, Шуткова³⁺ Светлана Александровна,
Нурахметов⁴ Турлыбек Нурахметович, Салиходжа⁴ Жусупбек Мухамеджанович
и Бадретдинов¹ Булат Рамилович

¹ Кафедра физической электроники и нанофизики. Физико-технический институт.
Башкирский государственный университет. ул. 3. Валиди, 32. г. Уфа, 450074.

Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (347) 229-96-47. E-mail: sha-t@yandex.ru

² Кафедра технологии нефти и газа. Технологический факультет. Уфимский государственный
нефтяной технический университет. ул. Космонавтов, 1. г. Уфа, 450074. Республика Башкортостан.
Россия. Тел.: (347) 243-15-35. E-mail: dolomatov@mail.ru

³ Кафедра теплоэнергетики и физики. Энергетический факультет. Башкирский государственный
аграрный университет. ул. 50-летия Октября, 34. г. Уфа, 450001. Республика Башкортостан. Россия.
Тел.: (347) 228-52-00. E-mail: Svetlana-Shutkova@yandex.ru

⁴ Кафедра технической физики. Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева.
ул. Сатбаева, 2. Астана, 010008. Казахстан. Тел.: +7 7172-65-32-29. E-mail: nurakhmetov_tn@enu.kz

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: нефтяные асфальтены, нанокластеры, метод молекулярной механики, потенциал ионизации, сродство к электрону, атомная силовая микроскопия.

Аннотация

Статья посвящена актуальной на сегодняшний день проблеме исследования надмолекулярной структуры нефтяных асфальтенов. Известно, что они проявляют полупроводниковые свойства, и, следовательно, являются перспективными материалами для нанолитоники. На данный момент свойства асфальтенов на надмолекулярном уровне изучаются различными экспериментальными методами и методами математического моделирования.

В качестве объектов исследования использовались асфальтены, концентрированные в оста-точных фракциях вакуумной перегонки западно-сибирской нефти с температурой кипения больше 500 °С. Асфальтены образцов выделяли растворением фракций в толуоле с последующим осаждением избытком *n*-гептана по методике Гольде. Результаты атомно-силовой микроскопии (АСМ-исследований) показывают существование устойчивых агрегатов из нанокластеров нефтяных асфальтенов в виде структур эллипсоидной формы высотой около 4.5 нм и латеральным размером до 100 нм.

Выполнено исследование надмолекулярной структуры нанокластеров нефтяных асфальтенов в программном пакете GAUSSIAN. Расчет был проведен методом молекулярной механики ММ[†] с полной оптимизацией геометрии. Структура молекулярных фрагментов наночасти асфальтенов определена ранее в соответствии с данными ЯМР ¹H, ¹³C и ИК спектроскопии и химического анализа. Эти данные согласуются с результатами работ по идентификации молекул асфальтенов методом АСМ высокого разрешения. Из расчетов следует, что наиболее устойчивы нанокластеры, имеющие вид квазикристаллических пачкообразных структур с числом молекулярных фрагментов от 2 до 10, при этом расстояние между плоскостями молекулярных фрагментов нанокластера находится в интервале от 3.53 до 3.67 Å, а диаметр частиц – от 11 до 40 Å. Данные по высоте нанокластеров удовлетворительно согласуются с результатами АСМ-исследований для малых структур. Расчеты надмолекулярной структуры нефтяных асфальтенов методом молекулярной механики показывают значительную энергию межмолекулярного взаимодействия структурных молекулярных фрагментов 60-118 кДж/моль, что свидетельствует о возможности самосборки упорядоченных структур из этих наночастиц, визуализируемых посредством АСМ. Полученные результаты подтверждаются данными рентгеноструктурного анализа и электрических измерений об энергии активации прыжковой электропроводности (129.58 кДж/моль), а также проведенными ранее термодинамическими расчетами. Как следует из расчетов, для нанокластеров характерна повышенная устойчивость квазикристаллической структуры, которая возникает, по всей вероятности, в результате переноса заряда между фрагментами, так как молекулы имеют низкий потенциал ионизации и высокое сродство к электрону.