

Исследование молекулярной и электронной структуры полициклических ароматических углеводородов каменноугольной смолы

© Шуткова¹⁺ Светлана Александровна, Доломатов^{2,3*} Михаил Юрьевич,
Запорин¹ Виктор Павлович и Доломатова¹ Милана Михайловна

¹ 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

² 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: dolomatov@mail.ru

³ 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

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: полициклические ароматические углеводороды (ПАУ), каменноугольные смолы, электронная адсорбционная спектроскопия, потенциал ионизации, средство к электрону.

Аннотация

Проведено исследование молекулярная и электронная структура асфальтенов каменноугольных смол. Объектами исследования являются асфальтены смол коксующегося Кузбасского угля. Регистрация спектров поглощения растворов в диапазоне 310-780 нм проводилась на спектрофотометре СФ-2000. В процессе изучения спектров поглощения асфальтенов методом оптической спектроскопии установлено, что асфальтеновая фракция является сильным донором и акцептором электронов. Установлены значения эффективного потенциала ионизации (6.64 эВ), эффективного средства к электрону (1.20 эВ) и ширины запрещенной зоны (5.44 эВ).

Исследование электронной структуры молекул полициклических ароматических углеводородов (ПАУ), являющихся ядрами молекул асфальтенов «континентального» типа, проведено методом DFT/B3LYP с базисным набором 6-31+G*, используя программный пакет GAUSSIAN. Квантово-химические расчеты показали, что первый вертикальный потенциал ионизации равен, что первый вертикальный потенциал ионизации находится в пределах от 6.41 до 6.71 эВ, средство к электрону – от 0.79 до 1.08 эВ, значения ширины запрещенной зоны – от 5.33 до 5.92 эВ. Рассчитаны дипольные моменты асфальтенов (от 0.32 до 0.46 D). Данные расчета подтверждают гипотезу о повышенной донорно-акцепторной способности асфальтосмолистых веществ.