

## Исследование химической, молекулярной и надмолекулярной структуры нанокластеров из асфальтенов западносибирской нефти

© Шуткова<sup>1+</sup> Светлана Александровна, Долomatov<sup>2,3\*</sup> Михаил Юрьевич,  
Гильмутдинов<sup>3</sup> Амир Тимирьянович

<sup>1</sup> Кафедра теплоэнергетики и физики. Энергетический факультет. Башкирский государственный аграрный университет. ул. 50-летия Октября, 34. г. Уфа, 450001. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: +7 (347) 228-52-00. E-mail: Svetlana-Shutkova@yandex.ru

<sup>2</sup> Кафедра физической электроники и нанофизики. Физико-технический институт. Башкирский государственный университет. ул. 3. Валиди, 32. г. Уфа, 450074. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: +7 (347) 229-96-47. E-mail: dolomatov@gmail.com

<sup>3</sup> Кафедра технологии нефти и газа. Технологический факультет. Уфимский государственный нефтяной технический университет. ул. Космонавтов, 1. г. Уфа, 450074. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: +7 (347) 243-15-35.

\*Ведущий направление; <sup>+</sup>Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** асфальтены, наноагрегаты, кластеры, метод молекулярной механики, потенциал ионизации, сродство к электрону, ИК-спектроскопия, рентгенофлуоресцентный анализ, криоскопия в нафталине, энергия межмолекулярного взаимодействия, энергия активации проводимости.

### Аннотация

Экспериментально и теоретически изучены химическая, электронная и надмолекулярная структуры нанокластеров из асфальтенов, выделенных из остатка атмосферно-вакуумной перегонки западносибирской нефти по методике Хайрудинова И.Р. Среднечисловая молекулярная масса образца, полученная методом криоскопии в нафталине, составляет 3820 а.е.м. Методом электронной спектроскопии определены эффективные потенциалы ионизации (5.59 эВ) и сродства к электрону (1.85 эВ). Элементный состав асфальтенов определен рентгенофлуоресцентным анализом на аппарате *Спектроскан Макс G*. Методом ИК-спектроскопии выполнен структурно-групповой анализ асфальтенов западносибирской нефти. На основе данных химического анализа и спектроскопии построены молекулярные фрагменты «континентального типа», из которых состоят наноагрегаты нефтяных асфальтенов. Структуры нанокластеров построены из 2-12 молекулярных фрагментов. Молекулярные массы нанокластеров находятся в интервале от 1012 (2 фрагмента) до 6216 а.е.м. (12 фрагментов).

Исследование электронной и химической структуры наночастиц асфальтенов проведено методом DFT/B3LYP с базисным набором 6-31+G\*, используя программный пакет GAUSSIAN. Расчет нанокластеров, образованных молекулами асфальтенов, был проведен методом молекулярной механики MM+ с полной оптимизацией геометрии. Квантово-химические расчеты свидетельствуют о том, что первый вертикальный потенциал ионизации молекул асфальтенов находится в интервале от 6.14 до 7.03 эВ, сродство к электрону – от 0.12 до 0.92 эВ. Рассчитаны значения энергии ван-дер-ваальсовского взаимодействия фрагментов в нанокластерах (0.03-3.14 эВ). Расчеты показали, что при увеличении количества молекул в кластере от 2 до 12 значения энергии активации проводимости нанокластеров, построенных из молекулярных фрагментов уменьшаются в интервале от 3.63 до 1.75 эВ.

Подтверждена непланарность нафтоароматических фрагментов в молекулах нефтяных асфальтенов. Двугранный угол между виртуальными плоскостями алкильных колец и плоскости кольца находится в интервале от 108 до 158°, что несколько отличается от тетраэдрической структуры, характерной для  $sp^3$ -гибридизации. Двугранный угол между плоскостью нафтоароматического кольца и плоскостью ароматических колец в структурах нанокластеров имеет различные значения, находясь в интервале от 161 до 168°. Расстояние  $h$  между виртуальными плоскостями нафтоароматических фрагментов нанокластера находится в интервале от 3.6 до 3.7 Å. Исследования показали, что при определенном количестве молекулярных фрагментов (около 9) наступает стабилизация образованных наноагрегатов, что приводит к образованию нанокластеров. Таким образом, подтверждается теория, согласно которой наиболее устойчивыми являются наноагрегаты, состоящие из 6-10 нафтоароматических пластин.

**Полная исследовательская публикация** \_\_\_\_\_ Шуткова С.А., Доломатов М.Ю., Гильмутдинов А.Т.

**Выходные данные для цитирования русскоязычной версии статьи:**

Шуткова С.А., Доломатов М.Ю., Гильмутдинов А.Т. Исследование химической, молекулярной и надмолекулярной структуры нанокластеров из асфальтенов западносибирской нефти. *Бутлеровские сообщения*. **2022**. Т.70. №6. С.1-10. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-70-6-1

*или*

Svetlana A. Shutkova, Mikhail Yu. Dolomatov, Amir T. Gilmutdinov. Study of chemical, molecular and supramolecular structure of nanoclusters from asphaltenes of West Siberian oil. *Butlerov Communications*. **2022**. Vol.70. No.6. P.1-10. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-70-6-1 (Russian)