

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Кафедра лазерной физики и спектроскопии

ГОРОДКО
Татьяна Игоревна

**Оптические и электронные характеристики функционализированных
нанопластин оксида графена**

Реферат дипломной работы

Научный руководитель:
кандидат хим. наук, доцент
Луговский А. А.
Научный консультант:
ведущий научный сотрудник,
кандидат физ.-мат. наук, доцент
Кухто А. В.

Минск, 2025

РЕФЕРАТ ДИПЛОМНОЙ РАБОТЫ

Городко Т.И.

Оптические и электронные характеристики функционализированных нанопластин оксида графена.

Научный руководитель – доцент кафедры лазерной физики и спектроскопии БГУ, кандидат химических наук, Луговский А. А.

Научный консультант – ведущий научный сотрудник Института ядерных проблем БГУ, кандидат физико-математических наук Кухто А. В.

Дипломное исследование состоит из введения, 3 глав, заключения, списка использованных источников (18) и занимает 56 страниц. В дипломной работе представлено 2 таблицы, 9 рисунков.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: оксид графена, функционализация, теоретическая модель, спектры поглощения, Gaussian.

Объект исследования – образцы функционализированного оксида коронена.

Цель исследования: с помощью программного пакета Gaussian исследовать теоретические молекулы оксида графена, в качестве которого использовался коронен и сравнить полученные теоретически спектры поглощения с экспериментальными спектрами поглощения функционализированного оксида коронена и аминопаратерфенила.

Методы исследования: функциональная теория плотности, абсорбционная спектроскопия.

В данной дипломной работе проведено теоретическое и экспериментальное исследование оптических и электронных свойств функционализированных нанопластин оксида графена. В качестве модели использован коронен и его оксидные формы, упрощённо воспроизводящие структуру графена. Для функционализации применялись молекулы аминопаратерфенила и диаминопаратерфенила.

С использованием программного обеспечения Gaussian и метода теории функционала плотности (DFT) выполнены квантовохимические расчёты геометрии, молекулярных орбиталей и спектров поглощения различных структур. В частности, исследовались изменения в распределении зарядов и энергетических уровнях HOMO и LUMO при функционализации короненовых структур.

Результаты расчётов показали, что функционализация приводит к снижению энергетического зазора HOMO–LUMO. Было установлено, что спектры поглощения функционализированных структур демонстрируют сдвиг

максимумов в длинноволновую область, что подтверждается экспериментальными данными. Особое внимание уделено сравнению теоретических спектров с экспериментальным спектром функционализированного оксида коронена. Наилучшее совпадение по положению максимумов наблюдается для структур, соответствующих функционализированному оксиду коронена диаминопаратерфенилом в одной плоскости и функционализированному оксиду коронена диаминопаратерфенилом перпендикулярно плоскостям, что свидетельствует об их высокой достоверности.

Работа подтверждает применимость короненовой модели и демонстрирует перспективность функционализации оксида графена линейными ароматическими соединениями для создания новых пористых электропроводных наноматериалов.

РЭФЕРАТ ДЫПЛОМНАЙ РАБОТЫ

Гарадко Т. І.

Аптычныя і электронныя характарыстыкі функцыяналізаваных нанапласцін акісленага графену.

Навуковы кіраўнік — дацэнт кафедры лазернай фізікі і спектраскапіі БДУ, кандыдат хімічных навук Лугаўскі А. А.

Навуковы кансультант — вядучы навуковы супрацоўнік Інстытута ядзерных праблем БДУ, кандыдат фізіка-матэматычных навук Кухта А. В.

Дыпломная работа складаецца з уводзінаў, 3 раздзелаў, заключэння, спісу выкарыстаных крыніц (18) і займае 56 старонак. У працы прадстаўлены 2 табліцы і 9 малюнкаў.

Ключавыя словы: акіслены графен, функцыяналізацыя, тэарэтычная мадэль, спектры паглынання, Gaussian.

Аб'ект даследавання — ўзоры функцыяналізаванага акісленага каронену.

Мэта даследавання: з дапамогай праграмнага пакета *Gaussian* даследаваць тэарэтычныя малекулы аксіду графену, у якасці мадэлі якога выкарыстоўваўся каронен, і параўнаць атрыманыя тэарэтычныя спектры паглынання з эксперыментальнымі спектрамі паглынання функцыяналізаванага аксіду каронену і амінапаратэрфенілу.

Метады даследавання: тэорыя функцыянала шчыльнасці (DFT), паглынальная спектраскапія.

У дадзенай дыпломнай працы праведзена тэарэтычнае і эксперыментальнае даследаванне аптычных і электронных уласцівасцей функцыяналізаваных нанапласцінак аксіду графену. У якасці мадэлі выкарыстаны каронен і яго акісленыя формы, што спрошчана адлюстроўваюць структуру графену. Для функцыяналізацыі прымяняліся малекулы амінапаратэрфенілу і дыамінапаратэрфенілу.

З выкарыстаннем праграмнага забеспячэння Gaussian і метаду тэорыі функцыянала шчыльнасці (DFT) выкананы квантахімічныя разлікі геаметрыі, малекулярных арбіталяў і спектраў паглынання розных структур. У прыватнасці, даследаваліся змены ў размеркаванні зарадаў і энергетычных узроўняў HOMO і LUMO пры функцыяналізацыі кароненавых структур.

Вынікі разлікаў паказалі, што функцыяналізацыя прыводзіць да змяншэння энергетычнага зазору HOMO–LUMO. Устаноўлена, што спектры паглынання функцыяналізаваных структур дэманструюць зрух максімумаў у даўгахвалеваю вобласць, што пацвярджаецца эксперыментальнымі дадзенымі. Асаблівая ўвага нададзена параўнанню тэарэтычных спектраў з эксперыментальным спектрам функцыяналізаванага аксіду каронену.

Найлепшае супадзенне па становішчы максімуму назіраецца для структур, што адпавядаюць функцыяналізаванаму аксідру каронену дыамінапаратэrfенілом у адной плоскасці і функцыяналізаванаму аксідру каронену дыамінапаратэrfенілом перпендыкулярна плоскасцям, што сведчыць пра іх высокую дакладнасць.

Праца пацвярджае прымяняльнасць кароненавай мадэлі і дэманструе перспектывнасць функцыяналізацыі аксідру графену лінейнымі ароматычнымі злучэннямі для стварэння новых электраправодных нанаматэрыялаў.

GRADUATE PROJECT ESSAY

Harodka T. I.

Optical and Electronic Properties of Functionalized Graphene Oxide Nanoplates

Scientific advisor – Associate Professor of the Department of Laser Physics and Spectroscopy at BSU, Candidate of Chemical Sciences, Lugovsky A. A.

Scientific consultant – Leading Researcher at the Institute of Nuclear Problems at BSU, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Kukhto A. V.

The thesis consists of an introduction, three chapters, a conclusion, a list of references (18 sources), and spans 56 pages. The work includes 2 tables and 9 figures.

Keywords: graphene oxide, functionalization, theoretical model, absorption spectra, Gaussian.

Object of research – samples of functionalized coronene oxide.

Research Objective: To use the *Gaussian* software package to theoretically investigate graphene oxide molecules, using coronene as a model, and to compare the theoretically obtained absorption spectra with the experimental spectra of functionalized coronene oxide and aminoparaterphenyl.

Research Methods: Density Functional Theory (DFT), absorption spectroscopy.

This thesis presents both theoretical and experimental studies of the optical and electronic properties of functionalized graphene oxide nanoflakes. Coronene and its oxidized forms were used as simplified models representing the structure of graphene. Functionalization was carried out using aminoparaterphenyl and diaminoparaterphenyl molecules.

Quantum chemical calculations of geometries, molecular orbitals, and absorption spectra of various structures were performed using *Gaussian* and the Density Functional Theory (DFT) method. In particular, changes in charge distribution and the energy levels of the HOMO and LUMO orbitals upon functionalization of coronene-based structures were investigated.

The calculation results showed that functionalization leads to a reduction in the HOMO–LUMO energy gap. It was found that the absorption spectra of the functionalized structures exhibit a redshift (shift toward longer wavelengths) of the absorption maxima, which is consistent with experimental data. Special attention was paid to comparing the theoretical spectra with the experimental spectrum of functionalized coronene oxide. The best agreement in the position of the maxima was observed for structures corresponding to coronene oxide functionalized with diaminoparaterphenyl in the same plane and perpendicular to the planes, indicating high reliability.

This work confirms the applicability of the coronene model and demonstrates the potential of graphene oxide functionalization with linear aromatic compounds for the development of new electrically conductive nanomaterials.