

РАЗМЕРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ТЕМПЕРАТУР ПЛАВЛЕНИЯ И КРИСТАЛЛИЗАЦИИ МОЛИБДЕНА

Ахмедов Э.Н.

ИПГ ДНЦ РАН, Махачкала, Россия

аep-code@yandex.ru

На основании RP-модели, формализм которой представлен в [1], рассчитано уравнение состояния (P) нанокристалла молибдена. Межатомное взаимодействие описывалось парным потенциалом Ми-Лен-нард-Джонса, параметры которого были определены нами путем подгонки под уравнение состояния, модуль упругости и коэффициент теплового расширения макрокристалла молибдена [2].

Исходя из критерия Линдемманна, при изобарических условиях ($P = 0$) рассчитана температура плавления (T_m) для нанокристаллов с различными размерами и формой поверхности. Оказалось, что величина T_m уменьшается при уменьшении числа атомов (N) в нанокристалле, причем это уменьшение идет заметнее при отклонении формы от наиболее энергетически оптимальной (для RP-модели это куб).

Поверхностное давление сжимает нанокристалл, и для того чтобы соблюсти изобаричность $P = 0$ мы должны увеличить межатомное расстояние, что облегчает плавление нанокристалла.

Для RP-модели кривые $T_m(N, P = 0)$ заканчиваются при N_{cr} – минимально возможном размере нанокристалла. Для куба $N_{cr} = 10$, и N_{cr} увеличивается при деформации формы нанокристалла. Если полагать, что значение N_{cr} это размер кристаллического зародыша с данной формой поверхности при $P(N_{cr}) = 0$, то можно получить размерную зависимость для температуры начала кристаллизации T_{cr} . Экстраполяция изобарической зависимости $T_{cr}^*(N_{cr}^{-\frac{1}{3}}) = T_{cr}(N_{cr}^{-\frac{1}{3}})/T_m(\infty)$ на макрокристалл ($N_{cr}^{-\frac{1}{3}} = 0$) показала, что значение $T_{cr}^*(N_{cr}^{-\frac{1}{3}} = 0)$ равно 0,713 для стержневидных и 0,857 для пластинчатых форм нанокристалла. Это согласуется с правилом Тарнбулла, что позволяет утверждать, что полученная зависимость $T_{cr}^*(N_{cr}^{-\frac{1}{3}})$ описывает размерную зависимость температуры начала кристаллизации Mo при $P = 0$.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант No 16-03-00041_a) и Программы Президиума РАН (программа No I.13).

1. М.Н. Магомедов. Кристаллография, 2017, 62, 3, 487-504.
2. E.N. E.Akhmedov. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 2018, 121, 62-66.

ИССЛЕДОВАНИЕ НОВЫХ ЭПОКСИДНЫХ КОМПОЗИЦИЙ С НАНОЧАСТИЦАМИ СЕРЕБРА МЕТОДАМИ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ СКАНИРУЮЩЕЙ КАЛОРИМЕТРИИ И РЕФРАКТОМЕТРИИ¹

Хасанова Р.Р.,^{*1} Жаворонок Е.С.,¹ Шабатин А.В.,² Сенчихин И.Н.²

¹Московский технологический университет (МИТХТ), Москва, Россия, ²ИФХЭ РАН, лаборатория физикохимии коллоидных систем, Москва, Россия

*khasanova_r@mail.ru

Полимерные нанокомпозиты с частицами металлов (в т. ч. серебра) обладают уникальными оптическими, теплофизическими и бактерицидными свойствами, что определяет актуальность их создания и исследования. Одним из интересных видов таких материалов являются нанокомпозиты на основе отверждающихся эпоксидных олигомеров (ЭО),

в которых наночастицы образуются при восстановлении ионов серебра из его прекурсора (соли). Важным условием формирования такого нанокомпозита является растворение прекурсора в олигомерной матрице. Поэтому целью работы является изучение восстановления серебра из его прекурсора (нитрата) в эпоксидных матрицах.

В качестве основных объектов исследования использовали диановый эпоксидный олигомер Epikote 828 с $M_n=375$ производства группы компаний Hexion (США) и полиглицидиловый эфир олигооксипропилентриола Лапроксид 703 с $M_n=732$ и $f_{EP}=2,43$ производства ООО «НПП Макромер». В качестве прекурсора металла использовали нитрат серебра (ч.д.а., Merck). Исследования проводили методами дифференциальной сканирующей калориметрии на приборе DSC Q-100 (TA Instruments, США) в диапазоне 188–473 К в атмосфере аргона при скорости нагрева 10 К/мин и рефрактометрии на приборе УРЛ-1 при 22°C по стандартной методике.

Экспериментальные результаты свидетельствуют, что на скорость восстановления ионов серебра из прекурсора влияют скорость растворения и возможность сольватации молекул нитрата серебра в ЭО. Показана роль природы эпоксидного олигомера при восстановлении Ag^+ в эпоксидной матрице. Проведенные исследования позволяют оптимизировать получение *in situ* стабильных нанодисперсий серебра в олигомерах, на основе которых планируется получение эпоксиаминных нанокомпозитов с улучшенными оптическими и иными свойствами.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (Проект № 17-08-00630).

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ВЯЗКОСТИ НАНОЖИДКОСТЕЙ

Пряжников М.И.,^{*1,2} Минаков А.В.,^{1,2} Рудяк В.Я.^{1,3}

¹СФУ, Красноярск, Россия, ²ИТ СО РАН, Новосибирск-90, Россия, ³НГАСУ, Новосибирск, Россия

*arrivent@yandex.ru

Интерес к наножидкостям устойчиво растет два последних десятилетия. Связано это с уже существующими и возможными в будущем их применениями. Так как обычно в приложениях имеют место течения наножидкостей, то определяющую роль играет их вязкость. Несмотря на значительный накопленный экспериментальный материал, здесь все еще продолжают дискуссии (см., например, обзоры [1–4]). Противоречия связаны с вопросом, зависит ли вязкость наножидкостей от размера частиц, и если зависит, то как [4].

В работе представлены систематические результаты исследования коэффициента вязкости наножидкостей. Всего было изучено несколько десятков наножидкостей на основе воды, этиленгликоля и машинного масла с наночастицами: SiO_2 , Al_2O_3 , TiO_2 , ZrO_2 , CuO , Fe_2O_3 , Fe_3O_4 , алмаз. Объемная концентрация частиц менялась от 0,1 до 8,0%. Размер частиц варьировался от 5 до 150 нм. Наночастицы были приобретены у компаний ОАО «Плазмотерм» (г. Москва) и ООО «Порошковые технологии» (г. Томск, частицы Fe_3O_4 , CuO). Все исследуемые в данной работе наножидкости приготавливались стандартным двухшаговым методом [5].

Измерение коэффициента вязкости наножидкостей проводилось с помощью ротационного вискозиметра Брукфильда DV2T со сменными шпинделями. Использовался также ротационный вискозиметр OFITE-900. Все измерения проведены при температуре 25 °C.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (проект №17-79-20218).