



*XIX Российская ежегодная конференция
молодых научных сотрудников и аспирантов*

*«Физико-химия и технология
неорганических материалов»
(с международным участием)*

**СБОРНИК ТРУДОВ
конференции**

18 - 21 октября 2022 г.

ИМЕТ РАН

Москва 2022

УДК 539.3/.6+ 544+ 546.03
ББК 24,1+ 24.5
Р76

ХІХ Российская ежегодная конференция молодых научных сотрудников и аспирантов «Физико-химия и технология неорганических материалов». Москва. 18 октября – 21 октября 2022 г. / Сборник трудов.

В сборнике материалов опубликованы тезисы докладов ХІХ Российской ежегодной конференции молодых научных сотрудников и аспирантов «Физико-химия и технология неорганических материалов», содержащие результаты фундаментальных исследований в области наук о материалах, включающих разработку физико-химических основ создания металлических и композиционных наноматериалов и нанотехнологий, керамики, интерметаллидов. В конференции приняли участие молодые научные сотрудники и аспиранты академических институтов, Государственных научных центров, а также студенты Высших учебных заведений России. Сборник предназначен для научных работников, специалистов, аспирантов, работающих в области наук о материалах, а также может быть полезен студентам старших курсов Высших учебных заведений.

Сборник материалов доступен на сайте www.m.imetran.ru

Организаторы конференции:

Российская академия наук,

Министерство науки и высшего образования РФ,

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова Российской академии наук,

Совет молодых ученых РАН,

Совет молодых ученых ИМЕТ РАН.

ISBN 978-5-4465-3757-0



9 785446 537570 >

0	916	1097	299,43	3040	0,965
0,3	945	1066	272,51	2247	1,24
0,5	924	1098	283,46	1709	1,22
0,7	932	1091	278,48	1506	1,07

Табл.2. – Результаты механических испытаний и акустические характеристики образцов из стали 15Х2ГМФ в исходном состоянии до ($N/N_f=0$) и после предварительного циклирования

По результатам проведенных исследований было установлено, что предварительное циклирование не привело к значительным изменениям механических свойств при растяжении как исходного материала, так и материала после эксплуатации. Однако акустические характеристики резко понизились по сравнению с теми же характеристиками для исходного состояния, что свидетельствует об исчерпании пластических свойств материала. Так, интенсивность и суммарное число АЭ-сигналов понизились почти на порядок, b -параметр снизился наиболее сильно в образце после предварительного циклирования до $N/N_f = 0,7$. Так же, как и при испытании материала до эксплуатации, наблюдалась стадийность изменения акустических параметров при растяжении с увеличенным временем затишья перед разрушением и снижением b -параметра (особенно при $N/N_f = 0,7$), что подтвердило возможность использования этих АЭ-характеристик в качестве диагностических показателей.

Было установлено, что общий уровень напряженности собственного магнитного поля в образцах после эксплуатации существенно ниже, чем в образцах до эксплуатации. Изменения напряженности собственного магнитного поля в образцах после эксплуатации протекают при меньших значениях относительной деформации. Скорость изменения данного параметра в образцах после эксплуатации на финальной стадии разрушения существенно больше, чем в образцах до эксплуатации.

В работе также установлено, что нелинейный характер изменения физических свойств материала при растяжении коррелирует с основными стадиями разрушения (стадиями упругости, деформационного упрочнения, достижения максимальной нагрузки и долома образца), а переход между стадиями, как правило, характеризуется резким изменением исследуемых параметров неразрушающего контроля, что может быть использовано при контроле состояния нефтяных насосных штанг.

Автор выражает благодарность проф. Л.Р. Ботвиной за руководство и помощь в проведении исследования.

Список литературы:

1. Шукюров Р.И., Тетюев В.А., Кривов М.П., Хасаев Т.М. Конструкционная сталь: пат. SU 685710 A1 USA. СССР, 1975.
2. Ботвина Л.Р., Тютин М.Р., Левин В.П., Иоффе А.В., Перминова Ю.С., Просвирнин Д.В. Механические и физические свойства, механизмы разрушения и остаточная прочность стали 15Х2ГМФ, используемой для изготовления нефтяных насосных штанг // Деформация и разрушение материалов. – 2020. – № 9. С. 22–34.
3. Дубов А.А., Дубов А.А., Колокольников С.М. Метод магнитной памяти металла и приборы контроля // Учебное пособие. 5-е изд. Москва: ИД «Спектр», 2012. 395 с.

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ И РЕГУЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ, ОБУСЛОВЛЕННЫХ ДЕФЕКТАМИ, В НАНОЛИСТАХ ZnO: ХИМИЧЕСКИЙ И РАСЧЁТНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

Ткаченко Д. С.

Россия, Санкт-Петербургский государственный университет, dmitry.tka12@gmail.com

В последнее время всё больше и больше исследований показывают, что дефекты играют важнейшую роль в регулировании свойств широкозонных полупроводников. К настоящему моменту уже известно, что они оказывают влияние на фотокаталитические, фотолюминесцентные, электрические, электрохимические и магнитные свойства полупроводниковых оксидов металлов, что привело к появлению нового термина — «свойства, обусловленные дефектами».

Среди исследуемых полупроводников наиболее активно изучаются нанообъекты ZnO ввиду их нетоксичности, легко контролируемой морфологии частиц, а также фотолюминесцентных, фотокаталитических и пьезоэлектрических свойств. Наиболее практико-значимыми

характеристиками из всех перечисленных являются фотокаталитические. Фотокатализ — то есть катализ, активируемый видимым излучением, — является дешёвым перспективным способом очистки сточных вод от циклических органических соединений.

При этом необходимо отметить, что в литературе до сих пор отсутствуют как общепринятые методики определения количества дефектов различной природы в нанопорошках, так и подходы и методики его регулирования. В связи с этим данная работа посвящена разработке таких методик, а также изучению фотокаталитической активности и возможности её предсказания на основании параметров наночастиц ZnO.

Нанопорошки ZnO были получены методом осаждения с последующим выдерживанием либо при кипячении, либо в гидротермальных условиях. Для дополнительного регулирования структурных параметров образцов варьировали скорость формирования наночастиц путём изменения содержания источников гидроксил-ионов и ионов цинка в реакционной среде. Для определения факторов, влияющих на вызываемые дефектами свойства наночастиц ZnO, образцы были охарактеризованы методами рентгенофазового анализа (РФА), ИК-спектроскопии, просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), определения удельной поверхности (БЭТ) и спектров поглощения. Количество дефектов и кислородных вакансий в полученных наночастицах было определено с использованием оригинального подхода из спектров комбинационного рассеяния света (СКР) и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС). Были определены проценты фотодеградации модельного красителя метиленового голубого в присутствии синтезированных образцов и сняты спектры фотолюминесценции при длине волны возбуждения в 365 нм. Также был измерен ζ -потенциал и оценён гидродинамический радиус образцов методом динамического рассеяния света водных суспензий.

Результаты проведённого комплексного исследования параметров синтезированных образцов показали возможность регулирования количества кислородных вакансий и дефектов путём увеличения температуры синтеза, а также за счёт введения в реакционную среду ионов, оказывающих влияние на процессы формирования наночастиц. При помощи квантово-химических расчётов зонной структуры и плотностей состояний образцов, содержащих кислородные вакансии, с использованием разработанной в ходе работы методики было показано появление энергетических уровней в запрещённой зоне, обуславливающих фотолюминесцентные и фотокаталитические свойства. Оценка энергии взаимодействия молекулы МГ с гранями наночастицы ZnO показала, что адсорбция более выражено протекает на боковой грани, тогда как основная часть листа остаётся свободной для образования радикалов. С использованием QSPR-моделирования из всего описанного набора переменных выделены основные, оказывающие влияние на фотокаталитические и фотолюминесцентные свойства образцов, и построена модель, позволяющая предсказывать конкретное значение процента деградации в зависимости от параметров нанопорошков, что открывает широкие перспективы разработки наноматериалов с заданными свойствами.

Автор работы выражает благодарность научным руководителям к. х. н., доценту кафедры общей и неорганической химии Института химии СПбГУ Осмоловской О. М., к. ф.-м. н., доценту кафедры физической химии Института химии СПбГУ Вознесенскому М. А., а также Кочневу Н. Д., д. х. н., профессору кафедры аналитической химии Кирсанову Д. О. и Ресурсным центрам СПбГУ «Рентгенодифракционные методы исследования», «Инновационные технологии композитных наноматериалов», «Междисциплинарный ресурсный центр по направлению “Нанотехнологии”», «Методы анализа состава вещества», «Вычислительный центр», «Оптические и лазерные методы исследования» и «Физические методы исследования».

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ НАНОКРИСТАЛЛОВ Co_3O_4 С ГРАФЕНОМ: АДГЕЗИЯ И КВАНТОВАЯ ЕМКОСТЬ

Шунаев В.В.

Россия, Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского, vshunaev@list.ru

Химические источники тока (ХИТ) являются неотъемлемыми структурными компонентами портативных и носимых устройств, разработка которых является одним из наиболее актуальных научных направлений. Одним из перспективных материалов для ХИТ считается, в частности, оксид кобальта Co_3O_4 , обладающий высокой теоретической емкостью (3650 Ф/г), низкой стоимостью и простотой синтеза. Однако в процессе литирования/делитирования оксид кобальта теряет свою стабильность и значительно расширяется, что приводит к потере емкости после даже небольшого