



*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

XIX 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 XIX 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 >

важными требованиями к сорбентам являются их экологичность, стоимость, легкость утилизации и регенерации. Поиски сорбентов, которые отвечают вышеуказанным требованиям и не оказывают токсического воздействия на окружающую среду, до сих пор продолжаются.

Гидроксипатит ($\text{HAp Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$) является безопасным и многофункциональным материалом, способным взаимодействовать с сорбатами различной природы – от ионов металлов до больших органических молекул. Высокая сорбционная способность HAp обусловлена возможностью замещения атомов кальция в кристаллической решетке на атомы других металлов, высоким значением удельной поверхности и значительным количеством поверхностных функциональных групп различного состава. Два последних фактора определяются морфологией частиц, которая в свою очередь, определяет сорбционные характеристики материала.

Формирование наночастиц по неклассическому механизму ориентационного присоединения позволяет в широких пределах регулировать их размер и форму. Он основан на получении исходных структурных блоков методом осаждения и иницировании их срастания с образованием более крупных частиц путем последующей гидротермальной обработки. В последние несколько лет количество работ в этой области резко возросло, однако, процессы формирования наночастиц HAp остаются до сих пор неизученными.

В связи с этим, целью данной работы являлось изучение процесса формирования наночастиц HAp по механизму ориентационного присоединения и изучение управляющих им факторов, а также исследование сорбционных характеристик образцов против основных классов загрязнителей сточных вод. Первичные и конечные наночастицы охарактеризованы комплексом методов: РФА (фазовый состав, параметры решетки и размер кристаллитов), МРК - моделирование размеров кристаллитов – для определения размеров и формы кристаллитов, ПЭМ и БЭТ (форма и размер наночастиц), ИК-спектроскопии (состав поверхности). Влияние состава реакционной среды на процесс ориентационного присоединения был изучен с использованием квантово-химических расчетов для определения выгодности взаимодействия ионов Na^+ , OH^- , NH_4^+ , NO_3^- с поверхностными гранями частиц.

Показано, что путем изменения температуры синтеза исходных структурных блоков могут быть получены частицы с близкими размерами, но разными параметрами кристаллической решетки, что позволяет регулировать выраженность срастания и размер конечных частиц (толщина от 28 до 40 нм и соотношение осей 1 : 2 и 1: 3).

Методами химического и расчетного эксперимента установлено, что в случае одного типа исходных блоков контроль за процессом ориентационного присоединения может быть легко достигнут путем введения в реакционную среду иона аммония, обладающего высоким сродством к поверхностям взаимодействующих частиц. Определена оптимальная минимальная концентрация __, отвечающая получению частиц с наименьшими размерами, показана возможность получения частиц с различным соотношением осей (толщина от 30 до 36 нм и длина от 58 до 84 нм).

Полученные наночастицы были апробированы в качестве сорбентов на органические красители, ионы металлов и ПАВ, как в индивидуальном состоянии, так и в составе композитов с альгинатом натрия. В частности было показано, что структура композита зависит от размера и формы неорганического компонента и оказывает влияние на эффективность сорбции красителя РБЖ и иона хрома.

Автор работы выражает благодарность научному руководителю к.х.н., доценту кафедры ОиНХ Института химии СПбГУ Осмоловской О.М. и магистру Главинской В.О., РЦ Научного парка СПбГУ «Рентгенодифракционные методы исследования», «Методы анализа состава вещества», «Нанотехнологии», «Геомодель», «Оптические и лазерные методы исследования», «Инновационные технологии композитных наноматериалов», «Физические методы исследования поверхности».

ЭФФЕКТИВНАЯ ОЧИСТКА ВОДЫ ОТ КРАСИТЕЛЕЙ РАЗЛИЧНОЙ ПРИРОДЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СФЕРИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ ДИОКСИДА ОЛОВА

Скрипкин Е.В.

Россия, Санкт-Петербургский государственный университет, skripkin.053@gmail.com

Проблема экологического состояния поверхностных вод и загрязнения водных ресурсов циклическими органическими соединениями, такими как красители, представляющими угрозу для окружающей среды, актуальна на данный момент из-за активного развития промышленности. Энергоэффективные системы для очистки сточных вод должны отвечать требованиям дешевизны, нетоксичности материалов и простоты конструкции, что приводит к активному внедрению процессов

фотокатализа с применением полупроводниковых материалов в схемы удаления циклических органических соединений (ЦОС). Фотокатализ представляет собой ускоренную деградацию ЦОС, обусловленную совместным действием облучения и катализатора, в роли которого выступают широкозонные наночастицы.

В настоящее время существует много исследований по изучению процесса фотокатализа, но для его использования в технологической практике и для достижения наилучшей эффективности необходимо понимать, какие факторы и особенности материалов влияют на этот процесс. На данный момент работ, направленных на решение этого вопроса, в литературе представлено мало.

Особенностью полупроводниковых наночастиц является большой набор параметров, оказывающих влияние на их свойства. Для установления определяющих фотокаталитические характеристики фактора целесообразно начинать работу с изучения наночастиц схожей морфологии (одинакового размера и формы).

Одним из перспективных фотокатализаторов является SnO_2 (полупроводник n-типа с шириной запрещенной зоны 3,6 эВ), наночастицы которого могут быть получены методом осаждения. Настоящая работа посвящена разработке подходов к регулированию структурных параметров наночастиц и изучению их взаимосвязи с фотокаталитической активностью, в том числе против красителей разных классов.

Для регулировки параметров образцов синтез проводился при трех разных температурах и с использованием двух процедур добавления реагентов, исходя из предположения о влиянии этих факторов на количество дефектов и кислородных вакансий в структуре наночастиц. Согласно данным РФА, все полученные образцы представляли собой SnO_2 (ICDD 01-072-1147) без примесей. Данные ПЭМ высокого разрешения, SAED и значения удельной поверхности показали, что наночастицы являются поликристаллическими, обладают сферической формой, их размер не превышает 5 нм. Определение количества структурных дефектов и кислородных вакансий проводилось с использованием разработанного нами оригинального подхода [1] к обработке данных КР-спектроскопии и РФЭС, соответственно. Значение запрещенной зоны определяли из спектров поглощения; была зарегистрирована ИК спектры наночастиц, определены значения дзета-потенциала и гидродинамических размеров.

Показано, что увеличение температуры синтеза приводит к уменьшению параметров ячейки образцов. Помимо этого, для обеих процедур синтеза зафиксировано ожидаемое уменьшение количества кислородных вакансий и дефектов с ростом температуры, что позволило получить шесть образцов с различным соотношением этих параметров.

Проведено тестирование фотокаталитической активности образцов разложением красителя метиленового голубого (МВ) – определены проценты деградации, темной адсорбции, квантово-химическими методами изучено взаимодействие красителя с поверхностью наночастиц, исследован состав поверхности фотокатализатора до и после темной адсорбции. Проведенное комплексное исследование позволило заключить, что основным фактором, определяющим фотокаталитические характеристики образцов, является соотношение вакансий и дефектов.

Для образца с оптимальными характеристиками изучена деградация таких используемых в промышленности органических красителей, как метиленовый голубой (96%), метиленовый фиолетовый (86%), хромовый темно-синий (27%) и родамин В (98%) с концентрацией 2 мг/л с излучением в УФ-диапазоне в течении 7 минут. Обнаруженное различие в коэффициентах деградации обусловлено различием в структуре красителей и требует дальнейшего изучения [2].

Благодарности: Работа была поддержана грантом РФФИ (20-03-00762-а) «Разработка подходов к компьютерному моделированию процессов роста наночастиц из растворов: теоретическое и экспериментальное исследование на примере диоксида олова – материала с фотокаталитической активностью». Автор выражает благодарности Осмоловской О.М. и Вознесенскому М.А., а также ресурсным центрам «Оптические и Лазерные методы исследования», «Нанотехнологии», «Методы анализа состава и вещества» «Рентгенодифракционные методы исследования», «Физические методы исследования поверхности» Научного парка СПбГУ.

Список литературы:

1. Kolesnikov I.E., Kolokolov D.S., Kurochkin M.A., Voznesenskiy M.A., Osmolowsky M.G., Lähderanta E., Osmolovskaya O.M. Morphology and doping concentration effect on the luminescence properties of $\text{SnO}_2:\text{Eu}^{3+}$ nanoparticles // *J. Alloys Compd.* – Volume 822 (2020) 153640.
2. Kolokolov D.S., Podurets A.A., Nikonova V.D., Vorontsov-Velyaminov P.N., Bobrysheva N.P., Osmolowsky M.G., Osmolovskaya O.M., Voznesenskiy M.A., SnO_2 nanoparticles with different aspect

СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ПОРОШКА ГИДРИДА ТИТАНА ПОЛУЧЕННОГО МЕТОДОМ СВС

Черезов Н.П.

Россия, Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения им. А.Г. Мерджанова РАН, ncherezov@ism.ac.ru

Титан является одним из металлов, способных активно поглощать водород и образовывать гидриды. Известно, что гидрид титана (TiH_2) представляет собой химическое соединение титана с водородом, где атомы водорода случайным образом распределены в пустотах тетраэдрической решетки титана. Гидрид титана имеет довольно широкое практическое применение в космической, авиационной, химической сферах и в ядерной энергетике. Гидрид титана используется для получения пористого титана, титановых фильтров и в качестве пенообразователя для производства пеноалюминия [1, 2].

Перспективным методом получения гидрида титана является самораспространяющийся высокотемпературный синтез (СВС). Синтез протекает без внешних энергозатрат, только за счет тепла химической реакции $Ti + H_2 \rightarrow TiH_2 + Q$ (39 ккал/моль) [3]. Таким образом, в работе представлены результаты исследования процесса горения титановой губки, структуры, фазового и химического состава и некоторых свойств гидрида титана, полученного методом СВС.

Гидрирование губки проводили в герметичном реакторе объемом 2 л, для фиксирования температуры использовали W-Re термпары. Перед синтезом реактор герметизировали и продували водородом для удаления воздуха. Далее, реактор заполняли водородом до давления 20 атм. В процессе горения, давление поддерживали путем периодической подачи водорода во встречном направлении распространения фронта горения. Гидрированную губку титана механически измельчали в стальной барабанно-шаровой мельнице со стальными мелющими телами.

В результате СВС-гидрирования титановой губки был получен гидрид титана с содержанием водорода 4 масс. %. По данным рентгенофазового анализа (рис. 1) продукт СВС-гидрирования представляет собой однофазный δ -гидрид титана с тетрагональной решеткой. Из теоретического расчета зависимости начального давления водорода в реакторе на адиабатическую температуру горения (рис. 2), можно отметить, что вначале, при повышении давления температура растет, но после достижения давления водорода приблизительно 23 атмосферы и мольного соотношения титана к водороду 1 к 5, температура начинает падать. На рис. 3 представлена термограмма, полученная в ходе эксперимента, где была зафиксирована температура экзотермической реакции взаимодействия титана с водородом, которая коррелирует с расчетными данными. Также зафиксирована скорость горения системы, которая составляет $\sim 1,75$ мм/с, что соответствует режимам низких скоростей. Было отмечено, что после достижения максимальной температуры происходит плавный спад температуры и в течении пары минут, температура сохраняется на уровне 800 °С, (на графике образуется плато) предполагается, что в это время происходит догорание, и молекулы водорода проникая вглубь частицы титана взаимодействуют с ним, тем самым поддерживая температуру.

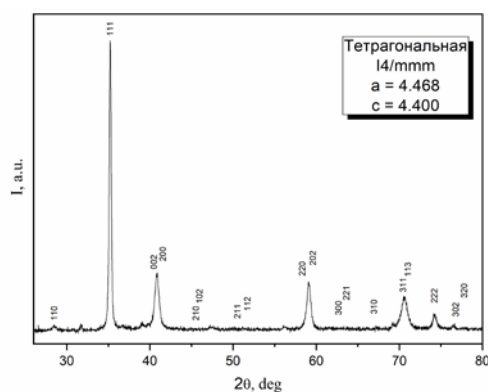


Рис. 1. – РФА измельченного гидрида титана, полученного СВС

ЭФФЕКТИВНАЯ ОЧИСТКА ВОДЫ ОТ КРАСИТЕЛЕЙ РАЗЛИЧНОЙ ПРИРОДЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СФЕРИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ ДИОКСИДА ОЛОВА	
Скрипкин Е.В.	194
СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ПОРОШКА ГИДРИДА ТИТАНА ПОЛУЧЕННОГО МЕТОДОМ СВС	
Черезов Н.П.	196
РЕГЕНЕРАЦИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПОРОШКОВ ПОСЛЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ В ТЕХНОЛОГИЯХ АДДИТИВНОГО ПРОИЗВОДСТВА	
Фадеев А.А.	198
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПОРОШКОВ, ОБРАБОТАННЫХ В 3D-ПРИНТЕРЕ	
Завертязев И.Д.	200
ПОЛУЧЕНИЕ СФЕРОИДИЗИРОВАННОГО МИКРОПОРОШКА ВОЛЬФРАМА ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ТЕРМИЧЕСКОЙ ПЛАЗМЫ ЭЛЕКТРОДУГОВОГО РАЗРЯДА ДЛЯ ЗАДАЧ АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ	
Дорофеев А.А.	201
АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ СОДЕРЖАНИЯ КИСЛОРОДА В ПОРОШКАХ СПЛАВА НА ОСНОВЕ ЦИРКОНИЯ НА ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ОБРАЗЦОВ ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ИСКРОВОГО ПЛАЗМЕННОГО СПЕКАНИЯ	
Баздника Е.А.	203
УДАРНО-ВОЛНОВОЕ КОМПАКТИРОВАНИЕ РЕАКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ W-ПТФЭ-AL В ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ АМПУЛАХ СОХРАНЕНИЯ	
Серопян С.А.	205
ВЛИЯНИЕ СОДЕРЖАНИЯ ПОЛИВИНИЛБУТИРАЛЯ НА ЗАКОНОМЕРНОСТИ СИНТЕЗА Ti-Cr-C С МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ СВЯЗКОЙ ИЗ ГРАНУЛИРОВАННОЙ СМЕСИ	
Абзалов Н.И.	206
СИНТЕЗ МАЛОСЛОЙНОГО ГРАФЕНА В УСЛОВИЯХ САМОРАСПРОСТРАНЯЮЩЕГОСЯ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СИНТЕЗА И ЕГО ПРИМЕНЕНИЯ	
Возняковский А.А.	209
ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ КАРБИДА КРЕМНИЯ С ЛЕГКОПЛАВКИМИ ОКСИДНЫМИ КОМПОЗИЦИЯМИ	
Кузнецов А.С.	210
ГРАФИТИЗАЦИЯ АЛМАЗНЫХ ЧАСТИЦ ПРИ ТЕРМООБРАБОТКЕ НА ВОЗДУХЕ В ТЕМПЕРАТУРНОМ ДИАПАЗОНЕ 600-1100 °С	
Золочевская В.А.	212
СВС-ЭКСТРУЗИЯ КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ Al_2O_3 -SiC-TiB ₂	
Чижиков А.П.	213