

В. Ю. Гарбарук
(ИММС НАН Беларуси, ОДО «НТЦ Ларта», Гомель)
Науч. рук. **В. А. Гольдаде**, д-р техн. наук, профессор

КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ ВОЛОКНИСТО-ПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИФЕНИЛЕНСУЛЬФИДА ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ИК ИЗЛУЧЕНИЯ

Улучшение характеристик материалов на основе полимеров позволяет расширить область их применения при изготовлении более ответственных изделий, эксплуатируемых в экстремальных условиях.

Перспективными являются композитные полимерные материалы, компоненты которых синергично улучшают свойства изделий. Надо отметить также важность технологической обработки такого рода материалов, позволяющей добиться требуемых характеристик для изделий, соответствующих требованиям эксплуатации. Одним из важных свойства полимера, обеспечивающих эксплуатационные параметры изделий, является степень кристалличности, показывающая отношение между количествами кристаллических и аморфных областей в объеме материала. Степень кристалличности полимера оказывает большое влияние на такие свойства, как плотность, твердость, проницаемость для жидкости, теплоемкость [1]. Предварительная обработка материала для повышения степени кристалличности используется при производстве термостойких фильтровальных материалов [2,3], однако не существует единого мнения о влиянии внешних факторов непосредственно при производстве изделий из таких материалов.

В данной работе исследовано влияние воздействия ИК излучения, а также технологических параметров экструзионного оборудования на степень кристалличности, а следовательно, и на технические свойства нетканых фильтрующих материалов на основе полифениленсульфида (ПФС) и полипропилена (ПП), полученных по технологии «melt blowing». Основной целью работы было увеличение термостойкости фильтрующих элементов для возможности их применения в фильтрах очистки от механических загрязнений высокотемпературных жидкостей, в частности теплоносителей.

В ходе эксперимента были изготовлены образцы цилиндрических фильтрующих элементов, разделенные на три группы: 1) без ИК обработки, 2) с последующей обработкой ИК излучением в туннельной печи, 3) с обработкой ИК-лампой в процессе изготовления и последующей выдержкой под излучением при остывании. В каждой группе

присутствовали образцы из чистого ПФС, а также содержащие полипропилен (ПП) в количестве 5 % масс.

После изготовления образцы выдерживали 24 часа при комнатной температуре для контроля технологической усадки изделия. Затем образцы помещали в воду с температурой 95 °С на 2 часа для проверки термостойкости в условиях, приближенных к рабочим. С помощью оптического микроскопа контролировали средний диаметр волокон непосредственно при изготовлении изделия, после выдержки и после погружения в воду. После обработки исследовали степень кристалличности и краевого угол смачивания.

Установлено, что образцы второй группы обладали на 8-14% меньшим диаметром волокон по сравнению с необработанными образцами. При этом образцы без ИК-обработки после выдержке в воде деформировались и изменили свои габаритные размеры. Образцы второй группы сохранили свою цилиндрическую форму, однако показали уменьшение длины в пределах 4%. Образцы группы 3 показали наименьшее значение усадки в пределах 1%, более того, в зависимости от технологических параметров, установленных при изготовлении изделий, у некоторых образцов длина не изменилась. Воздействие ИК-излучения можно было также наблюдать по изменению цвета материала: изначально бежево-желтый фильтровальный материал становился белым. Отмечено, что у образцов, имеющих в своем составе ПП, кристаллизация происходила быстрее и равномернее, тогда как у образцов из чистого ПФС имелись области, не изменившие цвет. После погружения в горячую воду именно эти области претерпевали деформацию и усадку, что можно связать с композитной структурой материала, в которой области ПП послужили зонами начальной кристаллизации.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что воздействие ИК излучения существенно меняет свойства полимерных микроволокнистых материалов, влияя на скорость и степень кристаллизации полимера. Учет этого воздействия совместно с подбором необходимых технологических параметров экструзионного оборудования позволяют получить изделия с улучшенными характеристиками, обладающие более широким спектром применений.

Литература

1. Тудрий, Е. В. Физико-химия полимеров / Е. В. Тудрий [и др.]. – Казань: Казан. ун-т, 2015. – 45 с.

2. Polyarylene sulfide melt blown fibers and products: pat. US 6,110,589 / Colin F. Harwood, Isaak Wasserman, Thomas C. Gsell, Glen Head. – Publ. date 29.08.2000.

3. Polyarylene sulfide resin compositions: pat. US 6,762,229 B2 / Namomitsu Nishihata, Masahito Tada, Hiroyuki Sato, Kiyomi Ohuchi. – Publ. date 13.07.2004.

Д. Ч. Гвоздовский
(БГУИР, Минск)

Науч. рук. **В. Р. Слемпицкий**, канд. техн. наук, доцент

**ПРИМЕНЕНИЕ ДВУМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ MX_2
(M – ПЕРЕХОДНЫЙ МЕТАЛЛ, X – ХАЛЬКОГЕН)
ДЛЯ ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКОГО РАСЩЕПЛЕНИЯ ВОДЫ:
ИССЛЕДОВАНИЕ В РАМКАХ DFT**

Двумерные материалы, в частности MX_2 на основе переходных металлов и халькогенов, привлекают большое внимание в качестве фотокатализатора при расщеплении воды, поскольку они обладают уникальными физическими и химическими свойствами, которые, возможно, легче удовлетворяют требованиям общего фотокаталитического расщепления воды по сравнению с объемными аналогами [1].

Ширина запрещенной зоны одного полупроводникового фотокатализатора должна соответствовать требованиям потенциала реакции восстановления с 0 эВ для катализа H_2O в H_2 (H^+/H_2) и потенциала реакции окисления с +1,23 эВ для окисления H_2O в O_2 ($\text{O}_2/\text{H}_2\text{O}$) при $\text{pH}=0$. Этот механизм называется одноступенчатым расщеплением воды. В качестве альтернативы, подходящий водный окислительно-восстановительный посредник может соединяться с двумя разными полупроводниками или даже с большим количеством, чтобы сформировать гибридный полупроводник. В частности, восстановление H^+/H_2 и окисление $\text{O}_2/\text{H}_2\text{O}$ могут происходить на двух отдельных полупроводниках (механизм расщепления воды по Z-схеме).

Расчеты электронных свойств 2D-материалов на основе халькогенов и переходных металлов проводились в рамках теории функционала плотности (DFT), реализованного в программном пакете Vienna *ab initio* simulation package (VASP) [2, 3]. Для описания взаимодействия электронов вблизи ядер использовалось полулокальное приближение GGA в виде функционала Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) [4]. Полулокальные GGA и локальные LDA приближения недостаточно хорошо