

Данная работа была выполнена при поддержке гранта РНФ (18-12-00395).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Savina A.A., Solodovnikov S.F. et al // J. Solid State Chem. – 2014. – Vol. 220. – P. 217.
2. Kresse G., Furthmuller J. // Phys. Rev. B – 1996. – Vol. 54. – P. 11169.
3. Kresse G., Joubert D. // Phys. Rev. B – 1999. – Vol. 59. – P. 1758.
4. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. // Phys. Rev. Lett. – 1996. – Vol. 77. – P. 3865.

УДК 678.072; 678.01

А.А. Таганова, студентка, А.С. Мостовой, к.техн.н.,  
(ЭТИ (филиал) ФГБОУ ВО СГТУ имени Гагарина Ю.А., г.Энгельс)

### **ВЛИЯНИЕ НАНОРАЗМЕРНОГО ОКСИДА АЛЮМИНИЯ НА ЭКСПЛУАТАЦИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЭПОКСИДНЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ**

Полимерные материалы на основе эпоксидных смол находят широкое применение при герметизации изделий электронной техники, при изоляции токоведущих частей деталей электротехнического назначения, для пропитки и заливки узлов в авиа-, судо- и автомобилестроении [1-4].

Поиск новых подходов и способов получения материалов с необходимыми промышленности свойствами является одной из главных задач современного материаловедения [1-4].

Введение нанодисперсных наполнителей является наиболее широко применяемым и высокоэффективным способом направленного регулирования свойств эпоксидных полимеров, позволяющим повысить показатели механической прочности и жесткости, химической стойкости, теплостойкости, диэлектрических свойств [3].

Целью данной работы являлось повышение эксплуатационных свойств эпоксидных композитов с применением в качестве наноструктурирующей добавки  $Al_2O_3$ .

В качестве полимерной матрицы использован ранее разработанный состав, состоящий из 100 масс.ч. эпоксидной смолы марки ЭД-20, 40 масс.ч. – трихлорэтилфосфата (ТХЭФ) и 15 масс.ч. отвердителя – полиэтиленполиамиона (ПЭПА).

ТХЭФ выполняет одновременно функции и пластификатора, и замедлителя горения. При этом достигается повышение в 2-2,5 раза

устойчивости эпоксидных композитов к изгибающим и ударным нагрузкам, а показатель воспламеняемости – кислородный индекс (КИ) возрастает с 19 до 27 % объемных. Таким образом, разработанный композит не поддерживает горение на воздухе и относится к классу трудновоспламеняемых.

В качестве структурирующей добавки использован нанодисперсный оксид алюминия. Размер частиц  $Al_2O_3$  составляет от 30 до 100 нм, со средним размером 60-70 нм, что дает возможность причислить его к наноматериалам.

$Al_2O_3$  вводился в эпоксидную композицию в количестве 0,01-0,1 массовых частей (масс.ч.). Для повышения равномерности распределения наномодификаторов, а также активации их поверхности и связующего применялась ультразвуковая обработка состава. Параметры ультразвукового воздействия: частота –  $22 \pm 2$  кГц, продолжительность 60 мин.

Результаты проведенных исследований показали, что наиболее рациональным содержанием  $Al_2O_3$  в качестве наномодифицирующей добавки является 0,05 масс.ч., так как при этом достигаются максимальные значения физико-механических свойств: в 2 раза возрастает изгибающее напряжение и на 27% повышается модуль упругости при изгибе, на 43% повышается прочность при сжатии, на 45-50% возрастает прочность и модуль упругости при растяжении, в 3 раза возрастает ударная вязкость, а также на 67 % возрастает твердость, табл.1.

Таблица 1 Свойства эпоксидных композитов

Состав композиции, масс.ч., отвержденной 15 масс.ч. ПЭПА	$G_{из}$ , МПа	$E_{из}$ , МПа	$G_{сж}$ , МПа	$G_p$ , МПа	$E_p$ , МПа	$a_{уд}$ , кДж/м <sup>2</sup>	$H_v$ , МПа
100ЭД-20	40	2654	78	26	2040	3	225
100ЭД-20+40ТХЭФ	53	1750	70	36	1610	8	84
100ЭД-20+40ТХЭФ+0,05 $Al_2O_3$	111	2227	100	53	2431	25	140

Примечание:  $G_{из}$  – изгибающее напряжение;  $E_{из}$  – модуль упругости при изгибе;  $G_{сж}$  – прочность при сжатии;  $G_p$  – прочность при растяжении;  $E_p$  – модуль упругости при растяжении;  $a_{уд}$  – ударная вязкость;  $H_v$  – твердость по Бринеллю; коэффициент вариации по свойствам 4-6 %.

Структурирующее действие  $Al_2O_3$  проявляется в эффекте малых добавок. Все известные полимеры микрогетерогенны и содержат как плотноупакованные, упорядоченные области, так и рыхлые более дефектные зоны, в которых локализуются малые добавки наномодификатора. Они играют существенную структурно-модифицирующую роль, способствуют кинетически стимулированной доупорядоченности полимера и увеличивают подвижность проходных цепей, обеспечивая их более плотную упаковку [2-4].

С учетом того, что используемый  $Al_2O_3$  наноразмерный, с высокой удельной поверхностью, это обеспечивает его хорошее взаимодействие с эпоксидным олигомером, что подтверждается равномерным ее распределением в составе композиции и полным отсутствием агрегатов частиц  $Al_2O_3$ , рис.2. По данным СЭМ введение  $Al_2O_3$  не изменяет структуру сетчатого полимера, рис.1.

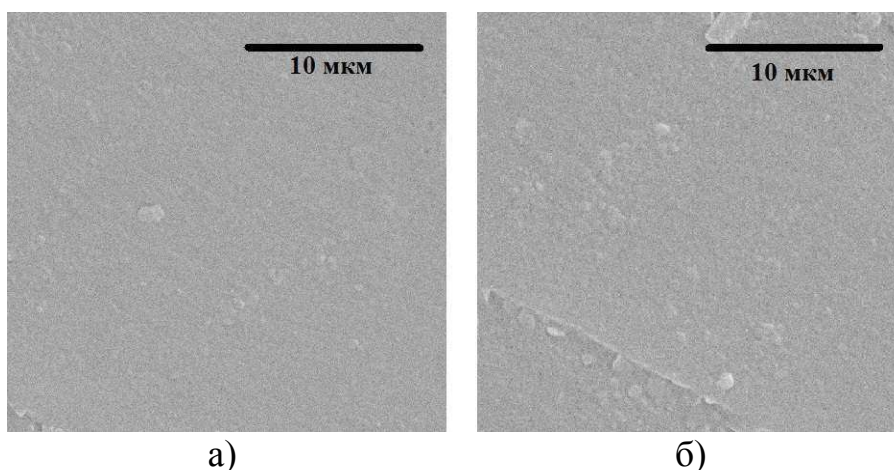


Рис.1. СЭМ образцов:  
а – 100ЭД-20+40ТХЭФ+15ПЭПА;  
б - 100ЭД-20+40ТХЭФ+0.05 $Al_2O_3$ +15ПЭПА

Методом термогравиметрического анализа было установлено, что введение 0,05 масс.ч.  $Al_2O_3$  не снижает термостойкость эпоксидных композитов на его основе, табл.2.

Введение малых добавок  $Al_2O_3$  в эпоксидный полимер обеспечивает повышение теплостойкости по Вика со 100 до 122 °С, табл.2.

Таким образом, проведенные исследования показывают эффективность использования  $Al_2O_3$  для наномодификации эпоксидных полимеров, которая обеспечивает значительное повышение их эксплуатационных характеристик.

Таблица 2. Физико-химические свойства эпоксидных композитов

Состав композиции, масс.ч., отвержденной 15 масс.ч. ПЭПА	$T_n$ , °C	$T_k$ , °C	Выход карбонизованных структур при $T_k$ , % масс.	$T_b$ , °C
100ЭД-20	200	390	40 (390 °C)	86
100ЭД-20+40ТХЭФ	180	360	55 (360 °C)	100
100ЭД-20+40ТХЭФ+0.05Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	180	365	50 (365 °C)	122

Примечание:  $T_n$ ,  $T_k$  – начальная и конечная температура основной стадии термолитиза;  $T_b$  – теплостойкость по Вика.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Осипов П.В., Осипчик В.С., Смотрова С.А., Савельев Д.Н. Регулирование свойств наполненных эпоксидных олигомеров // Пластические массы. – 2011. - № 4 – С. 3-5.
2. Мостовой А.С. Использование эпоксисиланов при создании эпоксидных композитов с повышенными физико-химическими и механическими свойствами // Перспективные материалы. – 2016. – № 4. – С. 60-66.
3. Мостовой А.С., Яковлев Е.А., Бурмистров И.Н., Панова Л.Г. Использование модифицированных наноразмерных частиц полититаната калия и физических методов модификации эпоксидных составов с целью повышения их эксплуатационных свойств // Журнал прикладной химии. – 2015. – Т. 88, № 1. – С. 138-149.
4. Мостовой А.С., Панова Л.Г., Курбатова Е.А. Модификация эпоксидных полимеров кремнийсодержащим наполнителем с целью повышения эксплуатационных свойств // Вопросы материаловедения. – 2016. – № 2 (86). – С. 87-95.

УДК 541.45/459

Tereshkov M.V., student, Tymchenko A.V., student  
Dontsova T.A., PhD (Chemistry)  
(Igor Sikorsky KPI, Kyiv)

### CALCULATION OF THE TOTAL ENERGY OF SnO<sub>2</sub> FRAGMENT OF STRUCTURE USING NWCHEM SOFTWARE

Quantum-mechanical characteristics of electrons and their behavior in general determine the total energy of the quantum system. Description of the behavior of electrons in a multi-electron system is somewhat difficult, since in such a system there are different types of interactions: exchange, exchange-correlation, etc. Thus, some approximations and simplifications