

Аналіз із перших принципів корозійної стійкості композиційного покриття, складеного із наночастинок нітриду кремнію, силану та епоксидної смоли

Степанюк О.М., Балабай Р.М.

Криворізький державний педагогічний університет,
пр. Гагаріна, 54, 50086, Кривий Ріг, Україна

Застосування гібридних органічно-неорганічних композиційних матеріалів сталося тоді, коли стало зрозуміло, що зменшення розмірів частинок призводить до появи нового фізичного явища, якого немає в матеріалах із більшим розміром частинок [1]. Такі композиційні матеріали створюються шляхом змішування двох, трьох (або більше) компонентів, а саме полімерної матриці та нанонаповнювача. Епоксидна смола є однією з найбільш часто використовуваних полімерних матриць для нанокompозитів через її високий модуль міцності, хімічну стійкість і хорошу технологічність. Хоча дослідники припускають, що розмір, форма, відносне розташування, хімічний склад і модифікація органічного композиту неорганічними наповнювачами повинні мати значний вплив на властивості кінцевих композиційних матеріалів, детальний механізм того, як взаємна орієнтація нанонаповнювача, молекул епоксидної матриці, інших компонентів через взаємодію між ними визначає корозійну стійкість композиту залишається неясним [2].

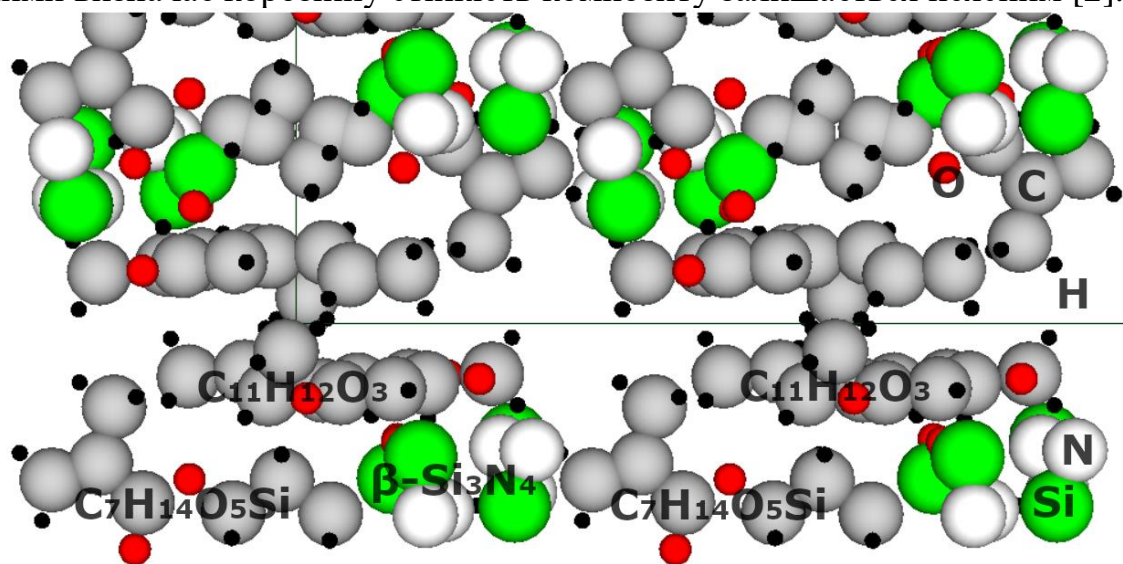


Рис. 1. Фрагмент ймовірної атомарної реконструкції композитного покриття із механічно змішаних (без хімічної взаємодії) молекул гідрогенізованого КН-570 (метакрилоїлсилан, C₇H₁₄O₅Si), молекул фенольної епоксидної смоли (C₁₁H₁₂O₃) та наночастинок β-Si₃N₄ (вид зверху)

Дана робота являє собою новий внесок в теоретичний аналіз епоксидно-силанових композитів, модифікованих наночастинами

нітриду кремнію, які будуть використовуватися як матеріал покриття металів для пригнічення ефекту корозії (рис.1). Мотивацією нашого чисельного експерименту стали дослідження методами скануючої електронної мікроскопії, спектроскопії електрохімічного імпедансу композитних епоксидних покриттів, наповнених силаном та частинками нітриду кремнію, виконаних авторами [3].

Нами були оцінені енергетичні рельєфи міграції молекул води по покриттю та крізь покриття, розраховані електричні заряди в околі атомів на шляху можливої міграції молекул води методами функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу із перших принципів за допомогою власного програмного коду [4].

Повна енергія всієї багатоатомної системи на кроках руху молекули води в рамках функціонала електронної густини визначалася як сума іонної та електронної енергій:

$$E_{tot} = E_{ion-ion} + E_{ee}[V_{ext}, \rho] = E_{ion} + E_{kin} + E_{ei-ion} + E_H + E_{XC} = \\ = \frac{e^2}{2} \sum_{\vec{p}, S, S'} \frac{z_S z_{S'}}{|\vec{p} - \vec{R}_S - \vec{R}_{S'}|} + T[\rho] + \int d\vec{r} V_{ext}(\vec{r}) \rho(\vec{r}) + \frac{e^2}{2} \int d\vec{r} \int d\vec{r}' \frac{\rho(\vec{r}') \rho(\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + \int d\vec{r} \rho(\vec{r}) \varepsilon_{XC}[\rho(\vec{r})]$$

де \vec{p} – вектори решітки Браве і \vec{R}_S ($\vec{R}_{S'}$) – вектори координат іонних остовів з зарядом z_S ($z_{S'}$) в одиничній комірці $\rho(\vec{r})$ - електронна густина.

Електронний заряд в околі атому А визначався різницею ($Z_A - q_A$):

$$q_A = Z_A - \int_{V_A} \rho(\vec{r}) d^3 \vec{r},$$

де Z_A - заряд іонного остову, V_A - сферичний об'єм навколо атому А.

1. Keast V. J. Corrosion processes of silver nanoparticles. Applied Nanoscience. 2022. URL: <https://doi.org/10.1007/s13204-022-02462-1>

2. Improvement of Corrosion Resistances of Organosilane-Epoxy Coating on Al Alloy 6101 with Addition of Zinc Phosphate Pigment / Ahsan Riaz Khan et al. Surface Engineering and Applied Electrochemistry. 2022. Vol. 58, no. 6. P. 720–730. URL: <https://doi.org/10.3103/S1068375522060096>

3. Excellent corrosion protection performance of epoxy composite coatings filled with silane functionalized silicon nitride / Y. Zhang et al. Journal of Polymer Research. 2018. Vol. 25, no. 5. URL: <https://doi.org/10.1007/s10965-018-1518-2>

4. Functionalization of Quasi-Two-Dimensional Materials: Chemical and Strain-Induced Modifications / A. G. Solomenko et al. Progress in Physics of Metals. 2022. Vol. 23, no. 2. P. 147–238. URL: <https://doi.org/10.15407/ufm.23.02.147>