

## ИССЛЕДОВАНИЯ СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ ПРИ ДОБАВЛЕНИИ КОБАЛЬТА

А.Н. Панченко, студент  
Волгоградский государственный университет  
(Россия, г. Волгоград)

DOI:10.24412/2500-1000-2023-5-5-50-53

**Аннотация.** Кобальт, известный своей прочностью, коррозионной стойкостью и устойчивостью к высоким температурам, дает ряд преимуществ при добавлении его в различные вещества. Рассматривается преимущество материалов, в структуре которых имеется кобальт. В статье с помощью DFT расчетов показана возможность получения полимерного композита, в состав которого входит полимер-пиролизированный полиакрилонитрил и элементарная ячейка кобальта.

**Ключевые слова:** пиролизированный полиакрилонитрил, кобальт, полимерный композит, конструкционные материалы.

В мире строительства и машиностроения поиск инновационных и долговечных строительных материалов является постоянным стремлением. Кобальт, переходный металл, известный своей прочностью, долговечностью и устойчивостью к коррозии, становится многообещающим дополнением к различным конструкциям.

При включении в конструкционные материалы кобальт действует как ценная добавка, обладающая рядом преимуществ:

1) Прочность и долговечность: кобальт придает материалам исключительную прочность и ударную вязкость.

2) Коррозионная стойкость: одним из наиболее значительных преимуществ кобальта является его замечательная стойкость к коррозии. Благодаря включению кобальта в конструкции материалы становятся менее восприимчивыми к ржавчине и деградации, вызванной влагой, химическими веществами и факторами окружающей среды.

3) Высокотемпературная стабильность: кобальт обладает отличной термостойкостью, что делает его пригодным для применения в высокотемпературных средах.

Кобальт можно интегрировать в широкий спектр веществ, для улучшения и модификации их свойств. Стали, легирован-

ные кобальтом, обладают исключительной прочностью, пластичностью и устойчивостью к износу. Ионы кобальта вступают в реакцию с цементной матрицей, образуя защитный слой, повышающий долговечность материала, уменьшающий растрескивание и минимизирующий попадание вредных веществ. Покрытия и краски на основе кобальта обеспечивают дополнительный уровень защиты конструкций, защищая их от коррозии, истирания и химического воздействия. Ученые постоянно изучают новые способы максимально использовать преимущества кобальта при модификации различных материалов.

Создание композиционных материалов самая перспективная область исследований. Включение кобальта в композиты, например в полимеры или керамические композиты, может привести к синергетическим эффектам, сочетая прочность и долговечность кобальта с легкостью и гибкостью других материалов [1-3].

В работе исследуется получение композитного материала на основе полимерной матрицы пиролизованного полиакрилонитрила [4-5] и кобальта. Кобальт имеет гексагональную решетку, параметры решетки  $a=2,505 \text{ \AA}$ ,  $c=4,089 \text{ \AA}$  (рис. 1).

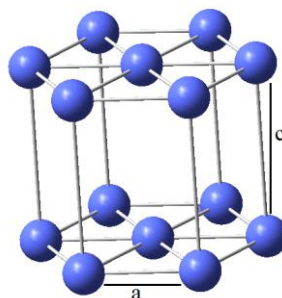


Рис. 1. Кристаллическая решетка кобальта

Рассматривались различные положения кристаллической решетки между слоями ППАН:

1) Грани основания кристаллической решетки расположены параллельно слоям ППАН, вид сбоку направлен на боковую грань;

2) Грани основания кристаллической решетки расположены параллельно слоям ППАН, вид сбоку направлен на ребро призмы;

3) Грани основания перпендикулярны слоям, боковые грани параллельны краям слоев, допированных азотом;

4) Грани основания перпендикулярны слоям, кристаллическая решетка ориентирована ребрами вдоль слоев допированных азотом;

5) Грани основания перпендикулярны слоям, боковые грани параллельны краям слоев, допированных водородом;

6) Грани основания перпендикулярны слоям, кристаллическая решетка ориентирована боковыми ребрами вдоль слоев допированных водородом (рис. 2).

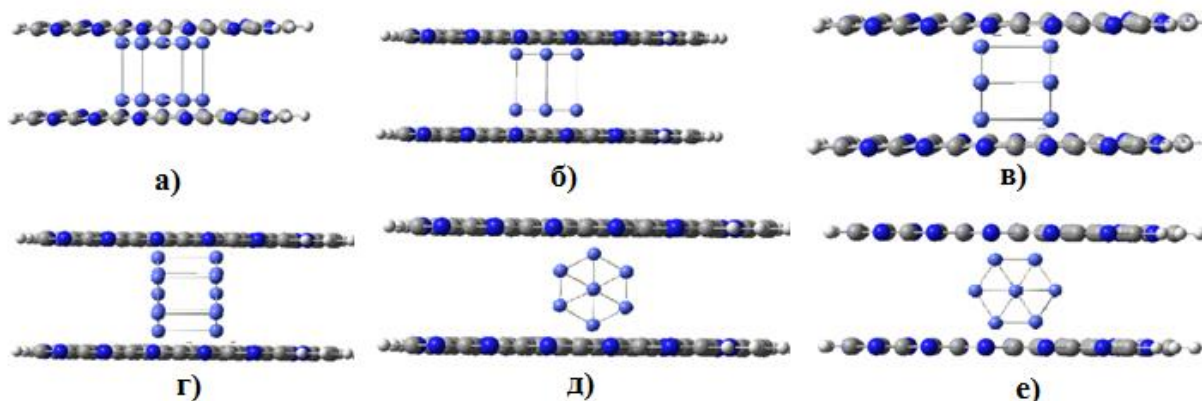


Рис. 2 Структура двухслойного пиролизованного полиакрилонитрила с кристаллической решеткой кобальта между слоями (вид сбоку). а) Вариант 1; б) Вариант 2; в) Вариант 3; г) Вариант 4; д) Вариант 5; е) Вариант 6

Расчеты были выполнены методом DFT с потенциалом V3LYP. В результате выполненных расчетов была определена энергия системы (табл. 1), которая вычислялась следующим образом:  $E_{\text{сист}} = E_{\text{полн}} - (E_{\text{ППАН}} + E_{\text{Co}})$ .

Сравнение результатов энергии системы для каждого варианта ориентации ЭЯ кобальта в межплоскостном пространстве полимера показала что, наиболее стабиль-

ным вариантом является структура №1, когда грани основания кристаллической решетки расположены параллельно слоям ППАН, вид сбоку направлен на боковую грань. Так как энергия системы практически одинакова для всех вариантов ориентации, то возможно существование всех предложенных металлополимерных композитов.

Таблица 1. Энергия системы различного расположения элементарной ячейки кобальта в межслоевом пространстве ППАН

Вариант расположения ЭЯ кобальта	1	2	3	4	5	6
Энергия системы, эВ	119,5	114,68	118,8	116,15	112,21	114,38

Анализ геометрии двухслойного ППАН, содержащей гексагональную решетку кобальта в межплоскостном пространстве после оптимизации параметров (рис. 2) показал, что наличие ЭЯ кобальта суще-

ственно влияет на планарное расположение слоев ППАН. Центры слоев сближаются к ЭЯ, когда расстояние между краями остается неизменным. ЭЯ кобальта не меняет своих геометрических параметров.

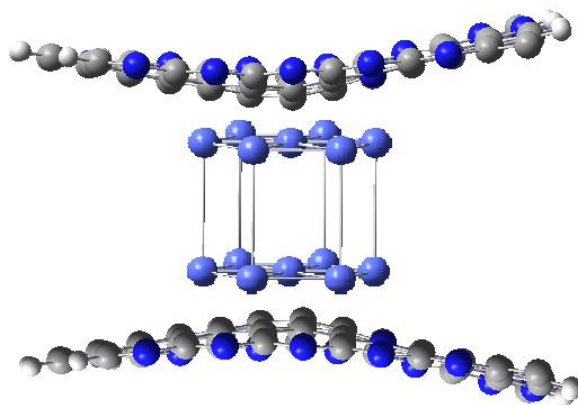


Рис. 2 Структура двухслойного пиролизованного полиакрилонитрила с кристаллической решеткой кобальта между слоями после оптимизации параметров (вид сбоку)

Анализ зарядового распределения установил, что атомы кобальта в узлах решетки меняют свой знак на противоположный, т.е. происходит перенос электронной плотности с атомов кобальта на атомы слоев ППАН, вследствие чего нейтральные атомы ППАН приобретают отрицательный заряд.

Заключение: добавления кобальта способствует прочности, термостойкости и коррозионной стойкости материалов, что позволяет модифицировать их первоначальные свойства. Теоретические расчеты

показали возможность существования композита на основе полимерной матрицы – пиролизованного полиакрилонитрила и элементарной ячейкой кобальта. Данные исследования являются начальным этапом для получения нового полимерного металлокомпозиата. Меняя концентрацию кобальта, в составе полимера можно контролируемо изменять свойства материала, что позволит создавать более прочные и устойчивые материалы, способные противостоять вызовам будущего.

#### Библиографический список

1. Лапшина, Л. С. Влияние содержания наночастиц оксида кобальта на износ пары трения сталь-сталь / Л. С. Лапшина, В. Э. Бурлакова // Инновационные технологии, экономика и менеджмент в промышленности: сборник научных статей по итогам XII международной научной конференции, Волгоград, 23-24 декабря 2021 года / НПП Медпромдеталь. Том Часть 1. – Волгоград: ООО «Конверт», 2021. – С. 124-126.
2. Ведь, М. В. Покрытия сплавами кобальт-серебро и кобальт-серебро-молибден: коррозионная стойкость / М. В. Ведь, Н. Д. Сахненко, М. А. Глушкова // Коррозия: материалы, защита. – 2015. – № 9. – С. 36-42.
3. Хорошилова, С. Э. Кобальтсодержащий композит: особенности синтеза и применения / С. Э. Хорошилова, Д. Ю. Корнилов // Вестник Северо-Кавказского государственного технического университета. – 2009. – № 1. – С. 49-53.

4. Какорина, О. А. Металлоуглеродные нанокompозиты на основе пиролизованного полиакрилонитрила с внедренными в межслоевое пространство атомами щелочноземельных металлов / О. А. Какорина, И. В. Запороцкова, Л. В. Кожитов // Физика и технология наноматериалов и структур: Сборник научных статей 3-й Международной научно-практической конференции. В 2-х томах, Курск, 23-25 мая 2017 года. Том 1. – Курск: Закрытое акционерное общество "Университетская книга", 2017. – С. 225-231.

5. Simulation of pyrolysed polyacrylonitrile based composite with amorphising boron additives / O. A. Kakorina, I. V. Zaporotskova, I. A. Kakorin, L. V. Kozhitov // Journal of Physics: Conference Series: Applied Mathematics, Computational Science and Mechanics: Current Problems, Voronezh, 11-13 ноября 2019 года. Vol. 1479. – Voronezh: Institute of Physics Publishing, 2020. – P. 012131. – DOI 10.1088/1742-6596/1479/1/012131.

6. Theoretical studies of the structure of the metal-carbon composites on the base of acrylonitrile nanopolymer / I. V. Zaporotskova, L. V. Kojitov, O. A. Davletova [et al.] // Журнал нано-и электронной физики. – 2014. – Vol. 6, № 3. – P. 03035.

## STUDIES OF THE PROPERTIES OF MATERIALS IN THE ADDITION OF COBALT

**A.N. Panchenko**, *Student*  
**Volgograd State University**  
**(Russia, Volgograd)**

***Abstract.** Known for its strength, corrosion resistance, and resistance to high temperatures, cobalt offers a number of advantages when added to a variety of substances. The advantage of materials in the structure of which there is cobalt is considered. Using DFT calculations, the article shows the possibility of obtaining a polymer composite, which includes a polymer-pyrolyzed polyacrylonitrile and a cobalt unit cell.*

***Keywords:** pyrolyzed polyacrylonitrile, cobalt, polymer composite, structural materials.*