

**ИССЛЕДОВАНИЯ МЕХАНИЗМА КОРРОЗИИ КОМПОНЕНТОВ
КОНСТРУКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ МЕТОДАМИ
ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ СКАНИРУЮЩЕЙ МАСС-СПЕКТРОСКОПИИ
И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ**

Филатов Е.С.¹, Гордеева Ю.Ф.¹

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: julia100990@inbox.ru

**STUDIES OF THE CORROSION MECHANISM OF COMPONENTS OF
STRUCTURAL MATERIALS BY DIFFERENTIAL SCANNING MASS-
SPECTROSCOPY AND THERMODYNAMIC MODELING**

Filatov E.S.¹, Gordeeva J.F.¹

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia, Yekaterinburg, Russia

Thermodynamic calculations of the interaction of a number of chloride salt systems with oxygen and water vapor (AlCl_3 , ZrCl_4 , $\text{AlCl}_3\text{-KCl}$, KAlCl_4), depending on temperature, were performed. The calculations were performed using the HSC Chemistry 6.11 software package.

Произведены термодинамические расчеты взаимодействия ряда хлоридных солевых систем с кислородом и парами воды (AlCl_3 , ZrCl_4 , $\text{AlCl}_3\text{-KCl}$, KAlCl_4), в зависимости от температуры. Расчеты выполнены с использованием пакета программ HSC Chemistry 6.11.

Экспериментальными физико-химическими методами (ИК-спектроскопией, дифференциально-сканирующей калориметрией, ДСК, термогравиметрией, ТГ) определены (идентифицированы) коррозионноактивные примеси, вызывающие повышенную коррозию материалов, в исходных реагентах хлоридов калия, алюминия и синтезированного из них хлоралюмината.

Выполнены химико-аналитические исследования состава хлоралюмината, находившегося длительное время в контакте с материалом оборудования, взятого из различных мест технологической схемы.

Методом микрорентгеноспектрального анализа исследован химический состав в ряде точек металлографического шлифа поврежденного участка материала оборудования.

Таким образом, термодинамические расчеты показывают, что присутствие кислорода и влаги недопустимо в реакционной среде. Поэтому необходимо удалять кислород и влагу из аргона и не допускать контакта реакционной среды (газовой и жидкой, солевой фаз) с воздухом.

1. Лякишева Н.П., Диаграммы состояния двойных металлических систем, изд. «Машиностроение», г. Москва, (1997).

2. Ивановский Л.Е., В.А.Хохлов, Г.Ф.Казанцев, Физическая химия и электрохимия хлоралюминатных расплавов, изд., «Наука», г. Москва, 1993.

CARBON DIOXIDE SORPTION ACTIVITY STUDY OF CARBOXYLATED CARBON NANOTUBES

Boroznina N.P.¹, Zaporotskova I.V.¹, Boroznin S.V.¹,
Grechko A.A.¹, Zaporotskov P.A.¹

¹) Volgograd State University

E-mail: n.z.1103@mail.ru

This paper presents the investigation of the interaction between carboxyl group-modified carbon nanotube and a carbon dioxide molecule. The studies were carried out using a non-empirical calculation method of DFT.

One of the current problems of technology development is the problem of energy saving and energy efficiency of new industries and used equipment [1]. As a rule, high-tech equipment consumes a large amount of electricity, which leads to various resource costs. Therefore, it is necessary to find new solutions and create new inexpensive universal sensor devices, the energy efficiency of which will be ensured by the use of fundamentally new materials, including as sensor sensors. As such highly efficient materials it is proposed to use a unique material of nanotechnologies - carbon nanotubes (NT), having the highest sorption capacity. They can be used to provide environmental monitoring, to control water and air pollution, to identify sources of industrial emissions and others [2, 3]. At present, these tasks in all fields use rather complex energy-intensive equipment (various gas analyzers, spectral devices, etc.).

Previous studies have found that SWNTs, including those modified with various elements, can be sensitive to certain gases [4,5].

This paper studies the interaction between the carboxyl group-modified carbon nanotube and carbon dioxide molecule. The interaction was modeled using step-by-step approximation of the CO₂ molecule. At the same time, two versions of orientation of carbon dioxide molecule relative to the system of SWNT-carboxyl group were investigated: 1 - oxygen atom is the nearest to the nanotube surface; 2 - carbon atom is the nearest to the nanotube surface. The analysis of the results showed that for all CO₂ molecule orientation variants, physical interactions representing weak Van der Waals interaction are realized. This will make it possible to judge the possibility of creating a sensor device sensitive to the presence of carbon dioxide, and such a sensor can be reused without its destruction, which could occur in case of chemical interaction of the CO₂ molecule.

Researches are executed with financial support of a grant of the Russian President №798.2019.1.

1. Buzea C., Pacheco I., Robbie K. Biointerphases. MR17 (2007).