

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА АДсорбЦИИ ПРОДУКТОВ ВЫСТРЕЛА НА ПОВЕРХНОСТИ УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКИ

Назаренко А.К.^{1*}, Авраменко О.И.¹, Борознина Е.В.¹, Какорина О.А.¹,
Ермакова Т.А.¹, Васильев В.А.²

¹⁾ Волгоградский государственный университет, г. Волгоград, Россия

²⁾ Волгоградская академия МВД России, г. Волгоград, Россия

*E-mail: and.nazarenko2011@yandex.ru

THE STUDY OF THE PROCESS OF ADSORPTION OF THE PRODUCT SHOTS ON THE SURFACE OF CARBON NANOTUBES

Nazarenko A.K.^{1*}, Avramenko O.I.¹, Boroznina E.V.¹, Kakorina O.A.¹,
Ermakova T.A.¹, Vasiliev V.A.²

¹⁾ Volgograd state University, Volgograd, Russia

²⁾ Volgograd Academy of the Ministry of internal Affairs of Russia, Volgograd, Russia

In this paper we have studied structural modified CNTs and effects of the modification to the nanotube surface adsorption. We have considered the possibilities of aluminum, lead and antimony atoms adsorption on the different types of carbon nanotubes as a base metal that make up the traces of the shot products. The calculations have been carried out by the semi-empirical PM3 scheme using the molecular cluster model.

В настоящее время было предложено несколько способов маркировки, как и пороха, так и капсюльного состава. Применение данного изобретения относится к области судебной баллистики, криминалистического исследования веществ материалов и изделий физико-химических свойств экспертизы продуктов выстрела и может быть использовано в следственной, судебно-экспертной, криминалистической и судебной практике, в частности к маркированию порохов углеродными нанотрубками, применяемому в боеприпасах к огнестрельному оружию с целью повышения надежности обнаружения его применения [1-2]. Ожидается, что задача маркировки пороха углеродными нанотрубками будет состоять в точности определения маркера, уменьшении трудоемкости операции приготовления порохов и т.д.

Для изучения процессов адсорбции основных металлов, входящих в состав следов продуктов выстрела (атомов алюминия, свинца и сурьмы) на поверхность углеродных нанотрубок было рассмотрено три структурных типа с различными граничными модификациями – «armchair» (6,6), «chiral» (3,6) и «zig-zag» (0,10) (см. рис. 1). Расчеты проводились в рамках модели молекулярного кластера с использованием полуэмпирической схемы PM3. Моделирование процесса адсорбции осуществлялось посредством пошагового приближения атомов металлов к внутренней поверхности кластеров. В результате были построены профили поверхностей потенциальных энергий взаимодействия углеродной нанотрубки и атомов металлов.

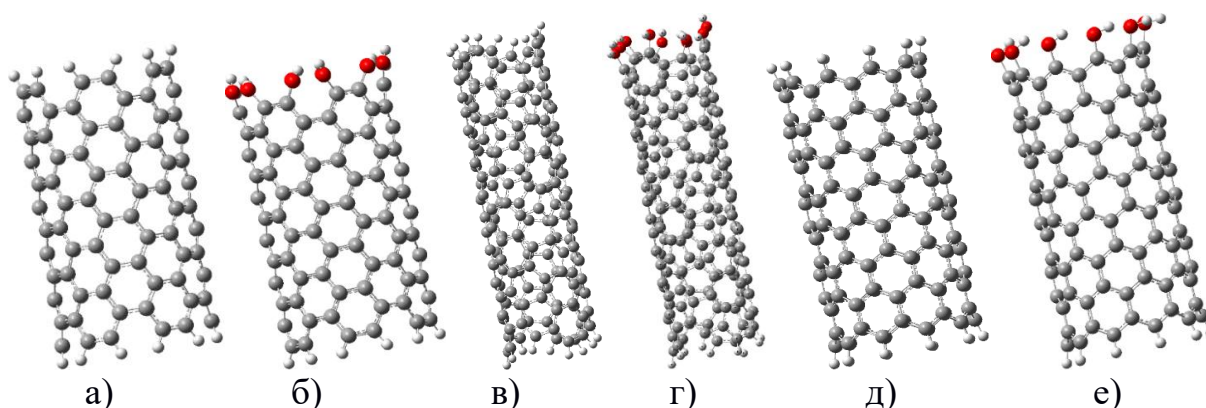


Рис. 1. УНТ, замкнутые псевдоатомами Н (УНТ кластер) размеров (6, 6) (а), (3, 6) (в), (0, 10) (д) и замкнутые псевдоатомами Н и группами ОН (УНТ-[ОН] кластер) размеров (6, 6) (б), (3, 6) (г), (0, 10) (е)

Было установлено, что во всех кластерах центр адсорбции для атомарной сурьмы находится на торце тубуленов. Атом алюминия будет адсорбироваться лишь в одном кластере – УНТ кластер размера (3,6). Адсорбция атома свинца не наблюдалась ни в одном из рассматриваемых кластеров.

1. Маркирующая добавка во взрывчатое вещество, способ ее приготовления, способ определения происхождения взрывчатого вещества и устройство для его осуществления, патент RU 2283823, С06В 023/00, G01J 003/30, G01N 033/22.
2. Патент RU № 2625462.

MULTI-GRAIN EVOLUTION UNDER SLOW, INTERMEDIATE AND FAST REGIMES OF SOLIDIFICATION IN MULTI-COMPONENT ALLOYING SYSTEM

Galenko P. K.^{1,2}, Nizovtseva I. G.^{1*}, Moelans N.³

¹) Ural Federal University named after first President of Russia B.N. B.N.Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

²) Friedrich-Schiller-Universität Jena, Jena, Germany

³) Katholieke Universiteit Leuven, Leuven, Belgium

*E-mail: nizovtseva.irina@gmail.com

A phase field model of rapid multi-grain growth is developed. Using a model of fast phase transformations [1] and a multi-phase model for polycrystalline growth in multi-component alloying systems [2], the Gibbs free energy change upon crystallization is formulated as driving force for polycrystalline growth. At a fixed pressure and constant temperature, the full Gibbs free energy is presented as a sum of the local equilibrium contribution, which is based on the set of slow thermodynamic variables (concentration and phase field, at a given temperature), and the local non-equilibrium contribution, which is based on the space of the fast thermodynamic variables (diffusion