

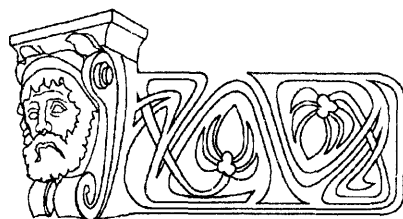


УДК 541.1

ВЗАИМОСВЯЗЬ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ И ЭКСПЛУАТАЦИОННЫХ ПАРАМЕТРОВ ТВЕРДЫХ МАТЕРИАЛОВ

П.А. Музалёв, О.С. Драгункина, С.В. Жучкова, В.А. Решетов

Саратовский государственный университет,
кафедра физической химии
E-mail: DragunkinaOS@rambler.ru



Целью нашей работы являлось установление новых связей известных энергетических характеристик с эксплуатационными параметрами. Установлена симбатная степенная зависимость между убылью удельной энтальпии образования твёрдых материалов и удельной энергией кристаллической решётки, что позволяет использовать $E_{кр.реш.}$ (уд.) в качестве одной из характеристических функций процесса прогнозирования и оптимизации их эксплуатационных свойств. Показано, что зависимость убыли удельной энтальпии образования твёрдых материалов от удельной теплоёмкости имеет экстремальный характер с максимумом по величине C_p в области 0,6–1,0 Дж/(г·К). Экспериментально было подтверждено существование такой зависимости на примере получения эпоксидного композита, что позволяет осуществлять прогнозирование и по величине C_p .

A Correlation between Energetic Parameters and Performance of Some Solid Materials

P.A. Muzalev, O.S. Dragunkina, S.V. Zhuchkova, V.A. Reshetov

The work was aimed at establishing new correlations between some known energetic characteristics of several materials and their performance. A symbatic power dependence between the specific formation enthalpy decrement of some solid materials and the specific energy of their crystal lattice has been found, which enables E (cr.lat.) (spec.) to be used as a characteristic function for the prediction and performance optimization process.

The correlation between the specific formation enthalpy decrement of solid materials and their specific heat capacity was shown to have a maximum within 0.6–1.0 J/(g·K). This correlation was confirmed experimentally with some epoxide component as an example, which allows prediction by C_p to be performed as well.

Разработка новых способов прогнозирования и оптимизации эксплуатационных свойств твердых материалов (в том числе композиционных) является первостепенной задачей современного материаловедения.

В последних опубликованных работах кафедры физической химии Саратовского госуниверситета изложены концептуальные положения о связи главной характеристической функции процесса получения твёрдых материалов ($-\Delta H_{обр.}$) с физико-химическими параметрами плотности, удельной теплоёмкости, удельного объёма и наиболее важными эксплуатационными показателями: пределом прочности при сжатии и растяжении,

твёрдости по Бринеллю, скорости распространения звука, объёмным электрическим сопротивлением, температурным коэффициентом линейного расширения, коэффициентом теплопроводности, показателем преломления. При этом выявлена чёткая симбатная связь между этой функцией и указанными эксплуатационными параметрами. В продолжение этих работ представлялось целесообразно осуществить теоретический и экспериментальный поиск новых функций состояния и их связей с важнейшими эксплуатационными параметрами.

Целью нашей работы являлось установление новых связей известных энергетических характеристик с эксплуатационными параметрами.

Доказано, что различия в расчётных величинах энергии кристаллической решётки по формулам Борна, Ферсмана и Капустинского являются не существенными, т.е. в принципе любая из этих формул может быть использована при расчетах $E_{кр.реш.}$

Между мольной и удельной величинами энергии кристаллической решётки наблюдается линейная зависимость, а следовательно, в целях прогнозирования можно использовать как мольные, так и удельные значения $E_{кр.реш.}$

С целью расширения возможностей прогнозирования нами была исследована зависимость функции убыли удельной энтальпии образования от удельной энергии кристаллической решётки (рис.1).

Видно, что указанная зависимость является симбатной, степенной. Следовательно, величину удельной энергии кристаллической решётки однозначно можно рекомендовать к применению в целях оптимизации свойств твёрдых материалов.

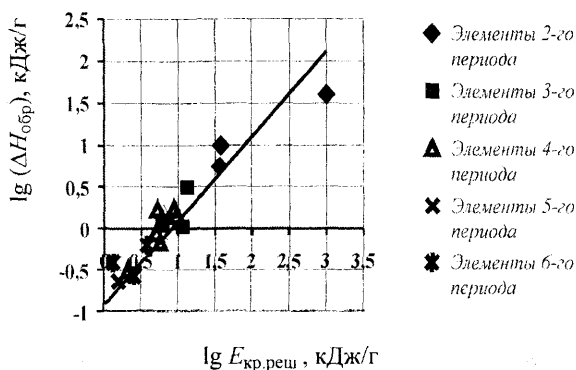


Рис.1. Зависимость убыли удельной энтальпии образования элементов ($-\Delta H_{\text{обр}}$) от удельной энергии их кристаллической решетки

Обнаружена теоретическая взаимосвязь величины убыли удельной энтальпии образования твёрдых материалов и удельной теплоемкости, как важнейших физико-химических показателей, определяющих свойства твёрдых материалов (рис.2).

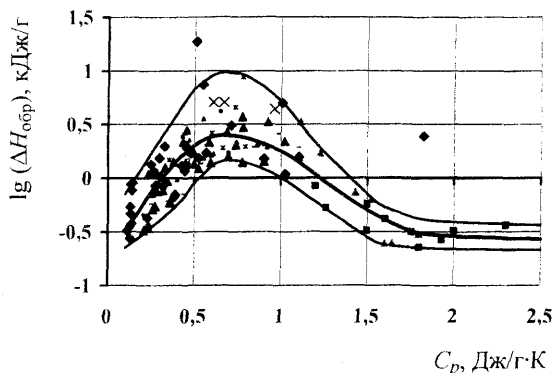


Рис.2. Зависимость удельной энтальпии образования различных классов твёрдых материалов от удельной теплоёмкости

Из рисунка видно, что зависимости являются экстремальными с максимумом в области C_p 0,6–1,0 Дж/(г·К). Это означает, что при указанных значениях C_p теоретически все эксплуатационные показатели твёрдых материалов выйдут на предельно высокий уровень и многофункциональность.

Существование данной экстремальной зависимости ($-\Delta H_{\text{обр}}$) от C_p экспериментально было доказано методом дифференциально-

интегральной сканирующей калориметрии на примере эпоксидного композиционного материала с ультрадисперсным наполнителем из карбонильного Ni. Эта зависимость (рис.3) действительно имеет экстремум в области $C_p = (0,8-1,0)$ Дж/(г·К), что подтверждает наши теоретические положения. Таким образом, по величине C_p можно осуществлять оптимизацию свойств композиционных материалов.

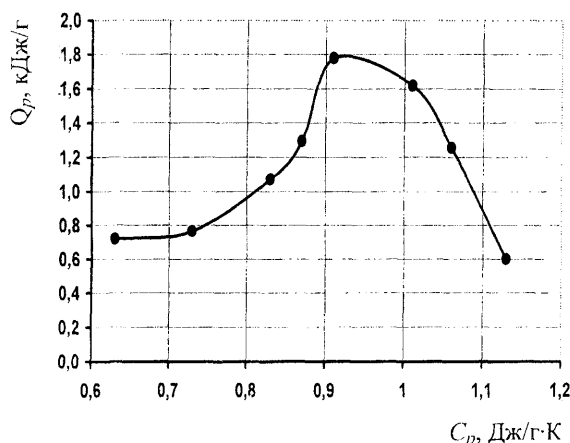


Рис.3. Зависимость площади удельного теплового эффекта процесса получения эпоксидно-металлических композитов от удельной теплоёмкости

Результаты

1. Установлена симбатная степенная зависимость между убылью удельной энтальпии образования твёрдых материалов и удельной энергией кристаллической решётки, что позволяет использовать $E_{\text{кр.реш}}(\text{уд.})$ в качестве одной из характеристических функций процесса прогнозирования и оптимизации их эксплуатационных свойств.

2. Показано, что зависимость убыли удельной энтальпии образования твёрдых материалов от удельной теплоёмкости имеет экстремальный характер с максимумом по величине C_p в области 0,6–1,0 Дж/(г·К). Экспериментально было подтверждено существование такой зависимости на примере получения эпоксидного композита, что позволяет осуществлять прогнозирование и по величине C_p .