Секция «Физика конденсированного состояния», научный руководитель – Андреева Н.В.

АНАЛИЗ ЭЛЕМЕНТА ЦИРКОНИЯ В МИКРОСТРУКТУРЕ И НАНОСТРУКТУРЕ

Ван Вей, Сю Шуайкай, Лю Цзяинь, Ван Яомин, Ерофеева Г.В.

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, e-mail: van.vei.91@mail.ru

Цирконий

Два типа решетки [1]

Структура решётки: гексагональная.

Параметры решётки: *a*=3,231 *c*=5,148Å

Структура решётки: кубическая объёмноцентрированная

Параметры решётки: a=3,16 Å

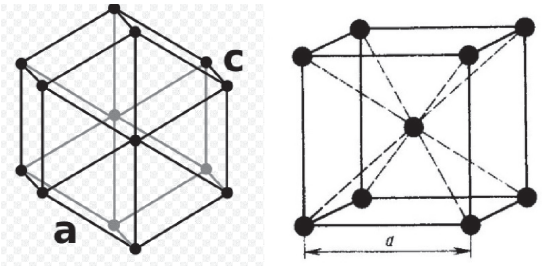

Рис. 1. Структуры решетки ГЦК и ОЦК

Физические свойства циркония в микроструктуре представлены в табл. 1.

Таблица 1

Свойства циркония и титана в микроструктуре

Свойства	Циркония	Титана
Плотность	6,506 г/см³	4,54 г/см³
Температура плавления	2125 K	1933K
Температура кипения	4650 K	3560K
Теплота плавления	19,2 кДж/моль	18,8 кДж/моль
Теплота испарения	567 кДж/моль	422,6 кДж/моль
Молярная теплоёмкость	25,3 Дж/(К·моль)	25,1 Дж/(К·моль)
Молярный объём	14,1 см³/моль	10,6 см³/моль
Температура Дебая	291K	380K
Теплопроводность	(300 K) 22,7 Вт/(м·К)	(300 K) 21,9 Вт/(м·К)
Цвет	Серебристо-серый	Серебристый

Поверхность Ферми

Поверхность Ферми имеет сложную геометрическую форму.

а *б*

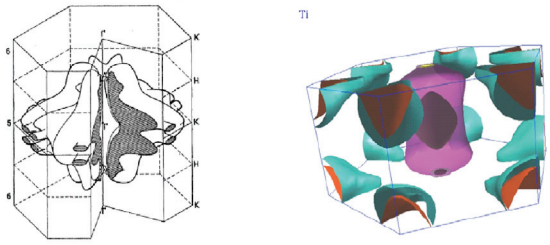

Рис. 2. Поверхность Ферми циркония (а) и титана (б) [1]

Свойства циркония, как и других элементов, зависят от топологии поверхности Ферми. Поверхность Ферми титана и циркония существенно отличаются, поэтому отличаются и их свойства (табл. 1), особенно температуры кипения.

Наноматериалы из циркония

О чистом нано цирконии информации нет, мы изучили диоксид циркония.

Свойства диоксида циркония [2]:

ZrO_2 (диоксид циркония), бесцветные кристаллы, $t_{пл}$ = 2715 °C. Оксид циркония – один из наиболее тугоплавких оксидов металлов. Диоксид циркония проявляет амфотерные свойства, нерастворим в воде и водных растворах большинства кислот и щёлочей, однако растворяется в плавиковой и концентрированной серной кислотах, расплавах щелочей. Сравнительные свойства циркония в микроструктуре и нано структуре показаны в табл. 2.

Таблица 2

Сравнительные свойства циркония в микроструктуре и нано структуре

Свойства	Микроструктура(Z_r)	Наноструктура(Z_rO_2)
Электропроводимость, См·м$^{-1}$	43	2,43
Температура плавления, °C	1852	2715
Плотность, г/см³	6,506	5,89
Длина свободного пробега, нм	0,6	25

Физические причины изменения свойства в наноматериале [3, 4]

Из сравнения свойств циркония в микроструктуре и нано структуре, можно сказать, что некоторые свойства циркония изменились. Физические причины специфики заключаются в следующем:

1. Цирконий в нано материале обладает склонностью к самоорганизации кластерных структур;
2. Большая доля атомов находится на выступах и уступах поверхности. Поэтому свободная поверхность является стоком бесконечной емкости для точечных и линейных кристаллических дефектов;
3. Поверхностные эффекты механических свойств;
4. Тонкие физические эффекты взаимодействия электронов со свободной поверхностью.

Выводы и применение циркония и его сплавов

После исследования элемента циркония в микроструктуре и нано структуре и сравнения свойств, выяснились, что нано структуре имеет особенные свойства по сравнению с микроструктурой, например, электропроводимость диоксида циркония резко уменьшается, и его температура плавления намного повышается. Эти свойства обусловливают широкое применение циркония в промышленности.

Цирконий входит в состав ряда сплавов (на основе магния, титана, никеля, молибдена, ниобия и других металлов), используемых как конструкционные материалы.

Новые перспективы его применения в различных областях:

1. Атомная энергетика;
2. Черная металлургия;
3. Цветная металлургия;
4. Химические и нефтеперерабатывающие промышленности;
5. Электроника и электротехника;
6. Сплавы циркония применяют в качестве конструкционных материалов в ядерных реакторах;
7. Сплавы циркония используют в качестве коррозионно – стойкого материала в химическом машиностроении [3-4].

Список литературы

1. AltmannS.L., BradleyC.J. Fermi Surface of Zirconium // Phy.Rev. Vol.135. № 5A. – 1964. – P. 1253 – 1256.
2. Химия циркония / У.Б. Блюменталь. – М., 1963.
3. Косогор С.П., Шулятникова О.А., РогожниковА.Г., НеменатовИ.Г. Применение сплава циркония. [электронный ресурс]. – режим доступа: http://bone-surgery.ru. – 25.11.13.
4. Безлина Е.В., Кулаков О.Б., Чиликин Л.В., Головин К.И. Цирконий и титан. // Дентальная имплантология. – 2002. – С 26-28.

ПЕСЧИНКИ КВАРЦА КАК ЯДРА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

Садыкова А.Ф., Никулин В.Н., Чукин В.В.

Российский государственный гидрометеорологический университет, Санкт-Петербург, e-mail: sadykova-1990@inbox.ru

Природные и климатические особенности нашей планеты в значительной степени связаны с водой. Тропосферные облака состоят из капель воды и кристаллов льда, причем кристаллы в облаках играют определяющую роль в формировании осадков. Содержание кристаллов льда зависит от метеорологических и географических факторов, а также от содержания аэрозолей в воздухе.

В данной работе мы описываем результаты экспериментального исследования явления кристаллизации переохлажденных капель воды, в которых содержались субстраты кварца. Так как наиболее эффективными ядрами кристаллизации в атмосфере являются нерастворимые частицы, то мы использовали песчинки кварца с целью заставить капли замерзнуть при температурах ниже 273K. Для проведения лабораторных экспериментов в Лаборатории метеотехнологий РГГМУ создана экспериментальная установка, которая работает в диапазоне температур от 253 до 268K. В ходе экспериментов определялись: площадь поверхности субстратов, температура капель и время, через которое начинался процесс кристаллизации капли.

Как показали опыты, площадь поверхности субстрата играет большую роль при кристаллизации. Капли, которые содержали в себе субстрат с большим радиусом замерзали быстрее, чем капли, в которых находились субстраты меньшего размера. По полученной зависимости числа замерзших капель от времени, для частиц кварца получено значение удельной линейной энергии равное 1.6·1011 Дж/м. В теории кристаллизации капель Чукина-Платоновой данный параметр характеризует кристаллизующие свойства субстратов: чем меньше удельная линейная энергия, тем легче образование кристаллов на субстрате.

Использование полученного значения энергии в численной модели кристаллизации капель позволяет рассчитать фазовое состояние облаков как функцию температуры воздуха и концентрации аэрозолей. Полагаем, что результаты данной работы позволят моделировать влияние аэрозолей на радиационные свойства облаков и приблизиться научному сообществу к ответу на вопрос о причине современных изменений климата.