

ЗОЛЬ-ГЕЛЬ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ СБОРА НЕФТЕПРОДУКТОВ НА ОСНОВЕ ОКСИДА МАГНИЯ

Эльшербини С.М.Э., Бойко А.А.

Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого, Гомель, Беларусь

В настоящее время проводится поиск и исследуется применение эффективных методов утилизации отходов, особенно способы удаления фенолов, ионов тяжелых металлов и нефтепродуктов из сточных вод [1].

Целью проводимых исследований являлась разработка технологических приемов получения компонентных металлооксидных систем в виде микропорошков, формируемых на основе высокопористых MgO-ксерогелей, содержащих восстановленную металлов в рентгеноаморфном состоянии. В ходе проведенных исследований были изучены сорбционные свойства синтезированных ксерогельных заготовок.

Применение нанопорошков металлов в технологических процессах спекания керамических изделий известно достаточно давно и эффективно применяется при создании металлокерамики и нитридсодержащих керамических материалов [2]. С другой стороны, свойства металлооксидных материалов, получаемых на основе оксида кремния и содержащих наночастицы восстановленных металлов, достаточно эффективно используется в биомедицинских исследованиях и терапии ряда заболеваний (в том числе и онкологических) - с помощью применения механизма целевой доставки биологически активных препаратов через барьерные системы защиты организма [3]. В нашем случае, с применением золь-гель метода был проведен контролируемый синтез наночастиц восстановленных металлов в структуре чистых высокопористых MgO-матриц [4]. Таким образом, осуществлялось формирование композиционных материалов состава $\text{MgO}:\text{SiO}_2:\text{ZnO}:\text{Y}_2\text{O}_3:\text{Fe}_2\text{O}_3$ и $\text{MgO}:\text{SiO}_2:\text{ZnO}:\text{Y}_2\text{O}_3:\text{Fe}_2\text{O}_3:\text{BaO}$, которые получались в виде ксерогельных заготовок, переводимых в дальнейшем путем размола в состояние высокодисперсных микропорошков. Особенности локализации фазы металла на поверхности химически инертной диэлектрической матрицы (а - $\text{MgO}:\text{ZnO}:\text{Y}_2\text{O}_3:\text{Fe}_2\text{O}_3$ и б- $\text{MgO}:\text{ZnO}:\text{Y}_2\text{O}_3:\text{Fe}_2\text{O}_3:\text{BaO}$) представлены на рисунке 1.

Из анализа рисунка видна рыхлая структура полученного ксерогеля, при этом наблюдается четко выраженная глобулярная структура пластинчатого вида, глобулы сформированы агрегатами, состоящими из частиц, имеющих достаточно широкий интервал распределения по размерам первичных зерен (от 114 до 377 нм).

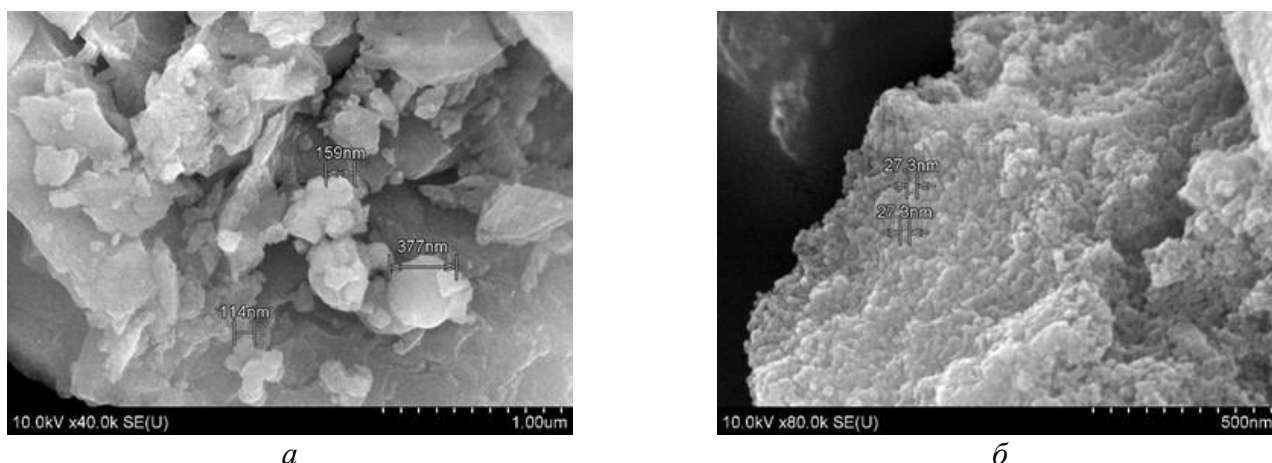


Рисунок 1 – СЭМ-изображение для микропорошка ксерогеля сформированного на основе золя из водной дисперсии MgO, Ксерогель был обработан на воздухе при $T=700^\circ\text{C}$ в течение 1 ч

Элементный анализ, проведенный методом EDX (EDS) показал, что синтезированный микропорошок состоит из (ат. %): а) O - 65,57; Mg - 30,94; Si - 2,49; Zn - 1,70; Fe - 1,17; Y - 1,76; б) O - 56,80; Mg - 16,37; Si - 11,81; Ba - 6,94; Zn - 1,13; Fe - 2,25; Y - 1,29. Видно, что цинк, иттрий, железо и барий распределяется по поверхности основной матрицы в виде неупорядоченной «сетчатой» структуры, что может положительно влиять на предполагаемые каталитические свойства синтезированных материалов.

В данной работе изучены структурные и сорбционные свойства формируемых ксерогелей.

Показана возможность их применения в качестве материалов, применяемых для сбора нефтепродуктов.

1. Pavlov A.V., Vasilyeva J.V. Investigation of sorbents of oil and oil products for the elimination of emergency oil spills in the seas of the arctic region // Regional environmental issues. 2019. № 5. p. 89-94.

2. Аль-Камали М.Ф.С.Х., Бойко А.А., Аль-Шаами Хамдан А.С. Мишени $\text{SiO}_2\text{:CuO}$ (Cu^0) для нанесения тонких пленок ионно-лучевого распыления, полученные золь-гель методом // Докл. нац. акад. наук Беларуси. 2022. Т. 66. № 3. С. 348–355.

3. Аль-Камали М.Ф.С.Х., Алексеенко А.А., Титенков О.А. Структурообразование SiO_2 - ксерогелей, содержащих соединения меди различного фазового состава - Structure formation of SiO_2 -xerogels containing copper compounds of different phase composition // Проблемы физики, математики и техники. Сер.: Физика. 2020. № 3 (44). С. 7-12.

4. Аль-Камали М.Ф.С.Х., Бойко А.А., Эльшербини С.М.Э. Композиционные материалы на основе оксида магния для сорбции нефтепродуктов, полученные золь-гель методом // Вестник ГГТУ им. П.О.Сухого. 2023. №3. С.28-35.

ПРЕДСКАЗАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК МНОГОАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ С ПОМОЩЬЮ МАТРИЦ КУЛОНА МЕТОДОМ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Юнусов М.Б.¹, Хуснутдинов Р.М.^{1,2}

¹Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

²Удмуртский федеральный научный центр УрО РАН, Ижевск, Россия
mukhammadbek@mail.ru

Важным этапом в исследовании материалов или прогнозировании новых материалов с заданными свойствами методами компьютерного моделирования является расчет энергетических параметров. К настоящему времени успешно применяются численные квантовомеханические методы, основанные на приближенных решениях уравнения Шредингера, среди которых можно отметить полуэмпирические и первопринципные методы. Данные методы позволяют на основе координат частиц R_i их зарядов Z_i рассчитать энергетические характеристики E многоатомных систем:

$$R_i, Z_i \rightarrow \text{Quantum Mechanical} \rightarrow E \quad (1)$$

Первопринципные численные методы возможно применять только при достаточном объеме вычислительных ресурсов, к тому же данные методы характеризуются длительным временем расчетов. Комбинирование квантовомеханических подходов и методов машинного обучения могут стать более эффективным инструментом в современном материаловедении. Используя соответствия между известными параметрами, например, координатами атомов R_i , зарядами атомов Z_i и энергетическими характеристиками E для исходного набора химических соединений, можно обучить модель для нахождения закономерности между указанными параметрами. Затем, используя данные закономерности, для другого набора химических соединений можно спрогнозировать значения недостающих параметров, например, энергетических характеристик E :

$$R_i, Z_i \rightarrow \text{Machine Learning} \rightarrow E \quad (2)$$

В представленной развивается метод, продемонстрированный в работах [1, 2], и позволяющий прогнозировать энергетические параметры молекул с помощью полносвязной нейронной сети на основе координат R_i и зарядов атомов Z_i , образующих молекулу. В качестве параметра для обучения модели нейронной сети выбрана энергия атомизации E_{at} - энергия, которую необходимо затратить для расщепления молекулы на отдельные атомы. В качестве данных по конфигурациям и энергетическим характеристикам молекул, применяемых для обучения, использован набор данных QM7 [1] – база данных из 7165 молекул, состоящих из элементов H, C, N, O, S и включающих не более 23 атомов. В качестве входных данных нейронной сети используются координаты и заряды атомов, представленные в виде матрицы Кулона (рис. 1). Элементы матрицы Кулона вычисляются, согласно выражениям: