

АННОТИРОВАННЫЙ ОТЧЕТ
по годовому этапу научно-исследовательской работы № 2951 в рамках базовой
части государственного задания в сфере научной деятельности по Заданию №
2014/107 за 2016 год

- 1. Тема:** Структурообразование серных композитных материалов: феноменологические и квантовомеханические модели
- 2. Номер государственной регистрации:** 114050840004
- 3. Руководитель:** Королев Евгений Валерьевич
- 4. Организация-исполнитель:** Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Московский государственный строительный университет»
- 5. Телефон руководителя:** 84991880400
- 6. Электронная почта руководителя:** grishinaan@mgsu.ru
- 7. Интернет-адрес (URL):** mgsu.ru
- 8. Сроки проведения:**
 - начало: 11.01.2016
 - окончание: 31.12.2016
- 9. Наименование годового этапа:** Теория структурообразования серных композитов
- 10. Плановое финансирование (рублей):**
 - проведения годового этапа: 3 307 800,00 руб.
- 11. Фактическое финансирование (рублей):**
 - проведения годового этапа: 3 307 800,00 руб.
- 12. Коды темы по ГРНТИ:** 31.01.77 31.15.03 29.19.24
- 13. Приоритетное направление:** Индустрия наносистем и материалов
- 14. Критическая технология:** Компьютерное моделирование наноматериалов, наноустройств и нанотехнологий.
- 15. Полученные научные и (или) научно технические результаты:** 1 С использованием полученных на первом и втором этапах НИР результатов экспериментальных исследований структуры и показателей макроскопических свойств композитных материалов различного назначения с серной матрицей, результатов моделирования структурообразования и свойств композитных материалов с серной матрицей, в т.ч. – результатов, полученных с использованием феноменологических моделей метода частиц и квантово-механических моделей из первых принципов, с учетом известных представлений полиструктурной теории были сформулированы положения теории структурообразования серных композитов: 1.1 Предпосылкой повышения показателей эксплуатационных свойств дисперсно-наполненных композитных материалов с серной матрицей является формирование однородной мелкокристаллической структуры серы, снижение количества кристаллических аллотропов и увеличение количества полимерной фазы. 1.2 Результаты исследования краевых углов смачивания расплавом серы для наполнителей различной природы свидетельствуют, что микроструктура серного связующего представляет собой лиофильную дисперсную систему; образование кластеров и агрегатов из частиц дисперсной фазы в

такой системе термодинамически невыгодно. Последнее подтверждается, в частности, результатами численного исследования структурообразования подобных дисперсных систем. 1.3 При прочих равных условиях эффективным способом управления реологическими характеристиками серных композиций является введение модифицирующих добавок. При этом, в зависимости от химической природы наполнителя и вида добавки, зависимость предельного напряжения сдвига от концентрации добавки может иметь экстремальный характер. 1.4 Основными методами управления показателями макроскопических свойств серных композитов являются: изменение химической природы активного наполнителя; варьирование объемной доли наполнителя и концентрации модифицирующих добавок. Зависимости показателей макроскопических свойств от двух последних рецептурных факторов, как правило, имеют экстремальный характер. 1.5 Перспективными технологиями целенаправленного формирования структуры серных композитов с повышенными показателями эксплуатационных свойств являются технологии физического и физико-химического модифицирования межфазной границы уровня микроструктуры, заключающиеся в обработке тонкодисперсной фазы растворами прекурсоров (каучуки) и последующих операциях, направленных на формирование на межфазной границе переходного слоя нанометрических размеров. 1.6 В зависимости от химической природы и минералогического состава тонкодисперсной фазы может оказаться целесообразной ее предварительная тепловая обработка, приводящая к удалению связанной поверхностной влаги и увеличению числа активных центров адсорбции прекурсора. 1.7 Переходной слой нанометрических размеров, сформированный на частицах тонкодисперсного наполнителя, не только ингибирует образование водорастворимых соединений за счет блокировки реакций в жидкой фазе технологической композиции, но и регулирует внутреннее напряженное состояние дисперсно-наполненных композитов с серной матрицей, снижая плотность дислокаций на межфазной границе уровня микроструктуры, имеющей наибольшую площадь. В конечном итоге это приводит к повышению показателей свойств как дисперсно-наполненных серных строительных композитов, так и каркасных материалов с многофазными пропиточными композициями на основе серы. 1.8 Показано, что использование серы в практике промышленного и гражданского строительства способствует расширению ассортимента строительных материалов, что, в свою очередь, позволит снизить стоимость строительства при одновременном увеличении отдельных эксплуатационных показателей строительных конструкций. 2 Предложен связанный с кинетикой информативных параметров сигналов акустической эмиссии скалярный параметр (медианное относительное механическое напряжение), который может быть использован в качестве количественной характеристики дефектности структуры серных композитов строительного назначения. 3 С использованием моделирования из первых принципов показано, что значения механических напряжений для стабильных конфигураций молекулярных кристаллов серы по порядку величины совпадают со значениями модуля нормальной упругости, найденными как экспериментально, так и из соотношения, связывающего модуль нормальной упругости с модулем объемной упругости и коэффициентом Пуассона. 4 Развитие материаловедения серных композитов строительного назначения требует накопления как фактического эмпирического материала, так и выполнения теоретико-расчетных работ, направленных на выявление структуры и свойств серных композитов строительного назначения на пространственных уровнях начиная от атомно-молекулярного. Среди методов моделирования структуры и свойств строительных композиций и композитов метод частиц отличается наибольшей универсальностью, сохраняя применимость на всей шкале пространственных масштабов – от десятков нанометров до долей метра; на атомно-молекулярном уровне возникает необходимость применения методов квантовой химии.

16. Полученная научная и (или) научно-техническая продукция: 1. Результаты выполненных работ обобщены в научной монографии «Серные строительные материалы: структурообразование, свойства, применение» для инженеров, научных работников, магистрантов и аспирантов технических образовательных организаций высшего образования. 2. При выполнении отчетного этапа работ получены результаты интеллектуальной деятельности – получены свидетельство о регистрации программ для ЭВМ «Модуль инициализации корневых файловых систем вычислительных узлов распределенной платформы eScience» (RU2016663423 приоритет

20.10.2016) и Система поддержки интерактивных сессий вычислительных узлов распределенной платформы eScience (RU2016663421 приоритет 20.10.2016). РИД имеют перспективы использования при реализации платформ «электронной науки». 3. Предложенная на втором этапе НИР архитектура распределенной функциональной аппаратно-программной платформы решения задач численного моделирования, а также выполненная на втором этапе НИР пилотная реализация указанной платформы, на отчетном этапе НИР позволили полностью реализовать распределенную платформу электронной науки (eScience), пригодную для решения широкого спектра задач – от пакетных численных расчетов, в т.ч. средствами графических процессоров, до интерактивных сессий, при которых один вычислительный узел обслуживает большое количество пользователей графических терминалов. При реализации платформы не использованы закрытые (проприетарные) решения, что существенно снижает ее стоимость по сравнению с аналогами. Возможности разработанной платформы делают ее применением перспективным и в образовательной деятельности. Возможные способы коммерциализации – инжиниринг (услуги, связанные с поставкой и монтажом оборудования) и техническая помощь (консультативные услуги по разворачиванию платформы и обучению персонала).

17. Ключевые слова и словосочетания, характеризующие результаты (продукцию): серный композит, структурообразование серных композитов, структурообразование серосодержащих композитов, феноменологическое моделирование, квантовая химия, электронная наука.

18. Наличие аналога для сопоставления результатов (продукции): Систематические исследования методов управления структурообразованием на уровне микроструктуры серных строительных композитов не производились. Научная монография «Серные строительные материалы: структурообразование, свойства, применение» не имеет аналогов по содержанию. Аналогом программного обеспечения «Система поддержки интерактивных сессий вычислительных узлов распределенной платформы eScience» является служба каталогов Active Directory, однако указанная служба каталогов непосредственно реализована только в закрытых операционных системах. В части прикладного окружения аналогами разработанной распределенной платформы «eScience» являются nanoHub (<http://nanohub.org/>), unihub – Технологическая платформа программы «Университетский кластер» (<https://unihub.ru>), nanoModel.ru – Виртуальный лабораторный практикум «Многомасштабное моделирование в нанотехнологиях» (<https://nanomodel.ru/>). В части функциональных возможностей распределенная платформа «eScience» аналогов не имеет.

19. Преимущества полученных результатов (продукции) по сравнению с результатами аналогичных отечественных или зарубежных НИР:

- а) по новизне: результаты являются новыми
- б) по широте применения: в рамках организации или предприятия
- в) в области получения новых знаний: в области получения новых знаний (для фундаментального научного исследования)

20. Степень готовности полученных результатов к практическому использованию (для прикладного научного исследования и экспериментальной разработки): выполнен прототип (установки, методики, системы, программы и т.д.)

21. Предполагаемое использование результатов и продукции: Выполнение работы способствует развитию технологии композитных материалов с серной матрицей, внедрение которых в практику промышленного и гражданского строительства позволит увеличить долговечность и длительность безремонтного периода эксплуатации строительных изделий и конструкций. Новые результаты, полученные в процессе выполнения НИР, используются в образовательном процессе НИУ МГСУ по дисциплинам, закрепленным за научно-образовательным центром «Наноматериалы и нанотехнологии». Разработанная распределенная платформа электронной науки эксплуатируется при решении задач численного анализа, а также в

образовательном процессе НИУ МГСУ по дисциплинам, закрепленным за научно-образовательным центром «Нanomатериалы и нанотехнологии».

22. Форма представления результатов: 1. Научно-технический отчет по 3 этапу НИР «Структурообразование серных композитных материалов: феноменологические и квантовомеханические модели». 2. Научная монография «Серные строительные материалы: структурообразование, свойства, применение» для инженеров, научных работников, магистрантов и аспирантов технических образовательных организаций высшего образования. 3. Одна статья в издании, индексируемом в базе WoS 4. Две статьи в изданиях, индексируемых в базе Scopus. 5. Два тезиса докладов в сборниках трудов международных конференций. 6. Два свидетельства о регистрации программ ЭВМ.

23. Использование результатов в учебном процессе: использование в преподавании существующих дисциплин

24. Предполагаемое развитие исследований: Сформулированные положения теории структурообразования композитных материалов с серной матрицей, а также разработанные технологии серных композитов, обладающих высокими показателями эксплуатационных свойств, являются предпосылкой разработке изделий и конструкций различного назначения, обеспечивающих экологическую безопасность и эффективность производств. Такие материалы могут быть использованы для изготовления ограждающих конструкций сооружений, подвергающихся воздействию химически агрессивных сред и электромагнитного излучения; для обустройства дорожной инфраструктуры; для изготовления невозвратных контейнеров для токсичных и радиоактивных веществ. Полученные результаты способствуют повышению конкурентоспособности отечественной экономики в долгосрочной перспективе на основе технологического обновления строительной отрасли и увеличению доли России на мировом рынке наукоемкой продукции.

25. Количество сотрудников, принимавших участие в выполнении работы и указанных в научно-технических отчетах в качестве исполнителей приведено в приложении №1

26. Библиографический список публикаций, отражающих результаты научно-исследовательской работы приведен в приложении №2

Ректор федерального государственного
бюджетного образовательного учреждения
высшего образования «Национальный
исследовательский Московский
государственный строительный университет»
М.П. 
Руководитель проекта

(подпись)

А.А. Волков

(подпись)

Е. В. Королев