

ORCID: 0000-0001-8267-8365

Д. І. Коломієць

Аспірант кафедри фізики, ННІ ІНФОТЕХ,
Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького, Черкаси,
Україна,
denyskolomiiets95@gmail.com

ORCID: 0000-0002-8434-1544

М. О. Пасічний

Кандидат фіз.-мат. наук, доцент,
завідувач кафедри фізики, Черкаський національний університет імені Богдана
Хмельницького, Черкаси, Україна,
pasichnyy@ukr.net

УДК: 538.9

PACS: 61.46.+w, 68.35.Rh, 81.10.-h

DOI: 10.31651/2076-5851-2021-12-31

СИНТЕЗ НАНОПОЯСКІВ ОКСИДУ ВАНАДІЮ ТА ВИКОРИСТАННЯ КОНЦЕПЦІЇ БАЛІСТИЧНИХ СТРИБКІВ ДЛЯ ОПИСУ ЇХ УТВОРЕННЯ²

У роботі досліджено процес синтезу нанопоясів пентаоксиду ванадію при інтенсивному перемішуванні суспензії комерційного порошку V_2O_5 у водному розчині $NaCl$. Розглянуто застосування концепції балістичних стрибків для опису формування анізотропних структур у нерівноважних системах під дією зовнішніх факторів (інтенсивного перемішування). Продемонстровано вплив температури та інтенсивності перемішування на процес синтезу нанопоясів пентаоксиду ванадію.

Ключові слова: наноструктури, нанопояски, оксиди металів, пентаоксид ванадію, нерівноважні системи, концепція балістичних стрибків.

1. Вступ

У роботі розглянуто ефективний метод синтезу нанострічок пентаоксиду ванадію, що може бути застосований для контрольованого синтезу наноматеріалів [1]. Цей метод має ряд переваг при створенні наноструктур за рахунок зміни динаміки реакцій, яку важко отримати з використанням твердотільних методів. Мікроструктура, розмір, дисперсність та морфологія нанорозмірних об'єктів можуть бути сильно змінені такими чинниками як температура, водневий показник рН, тиск тощо. Звичайно, існує велика кількість альтернативних способів синтезу наноструктур [2-4], але слід зазначити, що вони потребують більш складних технологічних умов синтезу. Останні дослідження в

² Статтю написано за результатами виконання НДР «Виконання завдань перспективного плану розвитку наукового напрямку «Математичні науки та природничі науки» (№ державної реєстрації 0121U113219), держбюджетної теми «Сингулярні розв'язки рівнянь математичної фізики в анізотропних і неоднорідних середовищах, моделювання процесів дифузії та абсорбції» (№ державної реєстрації 0119U100421), НДР «Утворення нанопоясків оксидів при інтенсивному перемішуванні – експеримент, теорія, застосування» (№ державної реєстрації 0121U113851). Автори вдячні професору Андрію Михайловичу Гусаку та Ярославу Дмитровичу Королю за допомогу у постановці загальної задачі, формулюванні теоретичної моделі, змістовні дискусії і допомогу у ході виконання експериментальних досліджень.

даному напрямку, показують, що інтенсивний механічний вплив на систему може суттєво змінити динаміку реакцій і створює нові можливості для синтезу наноструктур.

Значна увага при розвитку даного методу синтезу відведена пентаоксиду ванадію. Завдяки своїм фізико-хімічним властивостям і унікальній кристалічній структурі він дозволяє отримувати наноструктури які можуть бути використані при створенні літій-іонних батарей для накопичення електрохімічної енергії. Використання нанопоясів пентаоксиду ванадію в якості катода у вторинних батареях забезпечує легкий рух іонів і можливість окисно-відновних реакцій для забезпечення високої питомої ємності. Крім того, використання нанопоясів надає велику механічну гнучкість електроду батареї [5]. Однак виникає проблема пов'язана з технологією великомасштабного виробництва цих наноструктур, де можна було забезпечити збереження їх високої однорідності за розміром, морфологією і хімічним складом.

Дослідження та вивчення наноструктур на сьогодні є актуальним, оскільки робота у даному напрямку відкриває широкий спектр технологічних можливостей в електроніці та особливо у накопиченні енергії. Однак, розробка методів виготовлення наноструктур, які можна адаптувати для великомасштабного виробництва з низькою вартістю і які були б екологічно чистими, як і раніше, залишається серйозною проблемою. У даній роботі здійснено спробу застосувати концепцію балістичних стрибків до опису процесу утворення видовжених структур та проведено експериментальне дослідження процесу синтезу нанопоясів пентаоксиду ванадію із використанням гідромеханічного (гідротермічного) методу.

2. Застосування гідромеханічного методу до синтезу нанопоясів пентаоксиду ванадію

Для досліджень використано комерційний порошок V_2O_5 з розмірами частинок в межах 10-100 мкм. Приготування суспензії відбувалося наступним чином: у 150 мл. дистильованої води розчинялося 2 моля $NaCl$, рідина виводилась на робочу температуру ($25^\circ C$ або $60^\circ C$) після чого додавався комерційний порошок V_2O_5 . На наступному етапі забезпечувалась однорідність вихідної суспензії шляхом використання ультразвукового диспергатора для руйнування агломератів вихідних порошків. Для синтезу нанопоясів був виготовлений авторський пристрій з можливістю контролю температури та швидкості перемішування.

Під час перемішування проводилися вимірювання температури, водневого показника рН розчину, в'язкості досліджуваної суспензії. Синтезовані нанопояски досліджувалися методами растрової електронної мікроскопії (РЕМ) та рентгенівської дифрактометрії.

Встановлено, що на процес утворення нанопоясів впливають такі параметри як температура, інтенсивність перемішування а також вміст пентаоксиду ванадію та концентрація $NaCl$ у розчині.

Проведено цикл експериментів для встановлення впливу інтенсивності перемішування на процес утворення наноструктур, та побудовані відповідні графічні залежності (Рис.1).

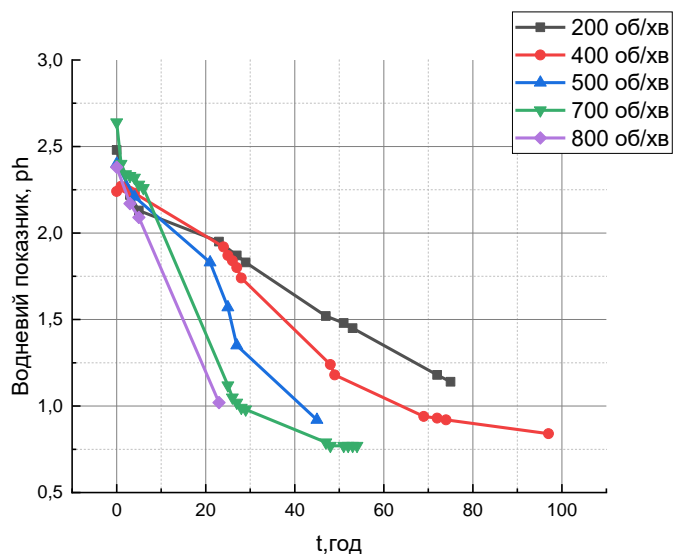


Рис. 1. Зміна водневого показника рН розчину у процесі синтезу нанопоясів V₂O₅ для різних значень швидкості перемішування при температурі суспензії 25°C.

Fig. 1. The change in the pH of the solution during the synthesis of V₂O₅ nanobelts at different stirring rates and at suspension temperature of 25°C.

На рис. 2-3 представлена поетапна послідовність процесу перетворення комерційного порошку пентаоксиду ванадію у нанопояси при 500 об/хв та при сталій температурі 25°C протягом всього експерименту.

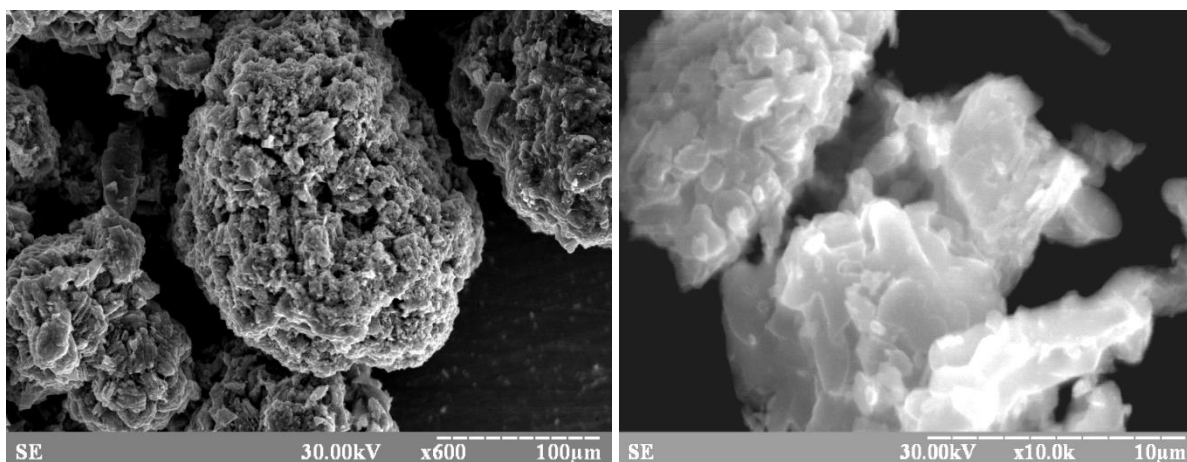


Рис. 2. РЕМ знімки вихідного порошку пентаоксиду ванадію.

Fig. 2. SEM images of the original vanadium pentoxide powder.

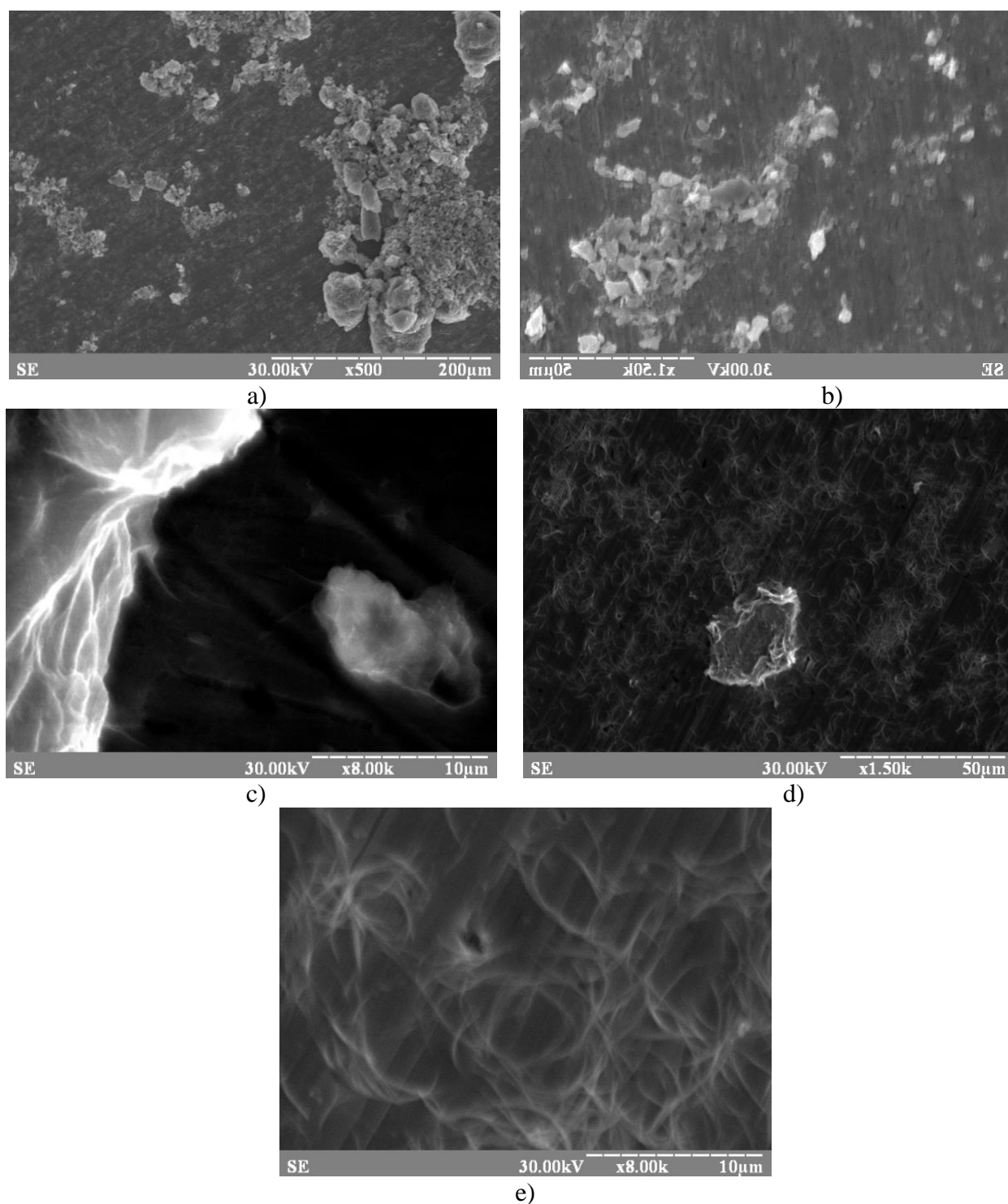


Рис. 3. РЕМ знімки процесу формування нанопоясів V₂O₅ при інтенсивному перемішуванні суспензії з частотою 500 об/хв при температурі 25 °С протягом: а) 4 год; б) 24 год; в) 48 год; г) 72 год; е) 96 год.

Fig. 3. SEM images of the process of V₂O₅ nanobelts formation with vigorous stirring of the suspension with a frequency of 500 rpm at temperature of 25 °C for: a) 4 hours; b) 24 hours; c) 48 hours; d) 72 hours; e) 96 hours.

Методом рентгенівської дифрактометрії зафіксовано повне перетворення кристалічних агломератів у нанокристалічний стан (Рис. 4).

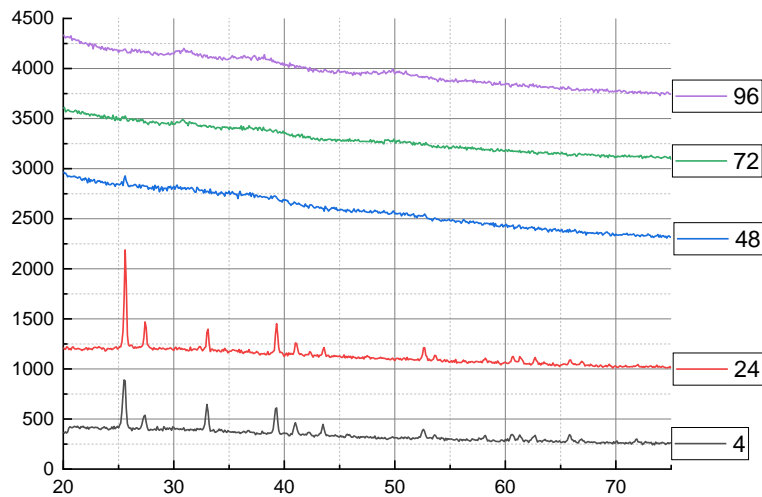


Рис. 4. Спектри рентгенівської дифрактометрії перетворення в нанопояси V₂O₅ при перемішуванні суспензії з частотою 500 об/хв при температурі 25°C протягом: 4 год, 24 год, 48 год, 72 год, 96 год.

Fig. 4. X-ray diffractometric spectra of transformation into V₂O₅ nanobelts with stirring of the suspension with frequency of 500 rpm at 25°C for: 4 hours, 24 hours, 48 hours, 72 hours, 96 hours.

Проведено цикл експериментів для встановлення впливу температури на процес утворення нанопоясів та побудовані відповідні залежності водневих показників та в'язкості досліджуваних суспензій. На рис. 4-10 представлені результати впливу температури та інтенсивності перемішування на водневий показник та в'язкість суспензії у процесі синтезу.

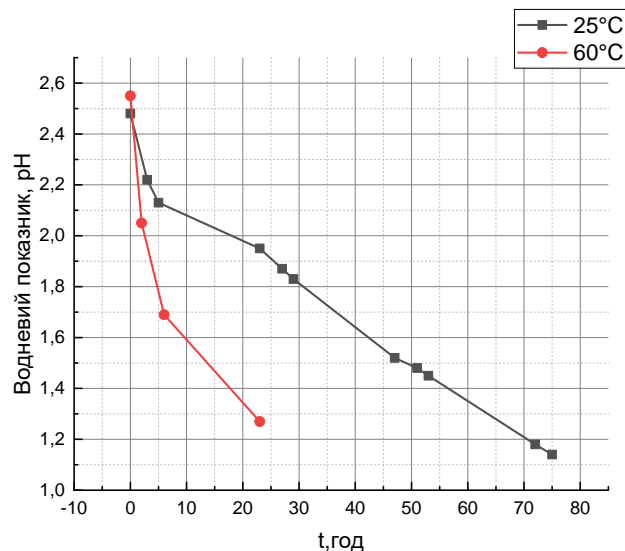


Рис. 5. Зміна водневого показника рН розчинів у процесі синтезу нанопоясів V₂O₅ для швидкості перемішування 200 об/хв при температурах суспензії 25°C та 60°C.

Fig. 5. Change of hydrogen index pH of solutions in the process of synthesis of V₂O₅ nanobelts at stirring speed of 200 rpm and at suspension temperatures of 25°C and 60°C.

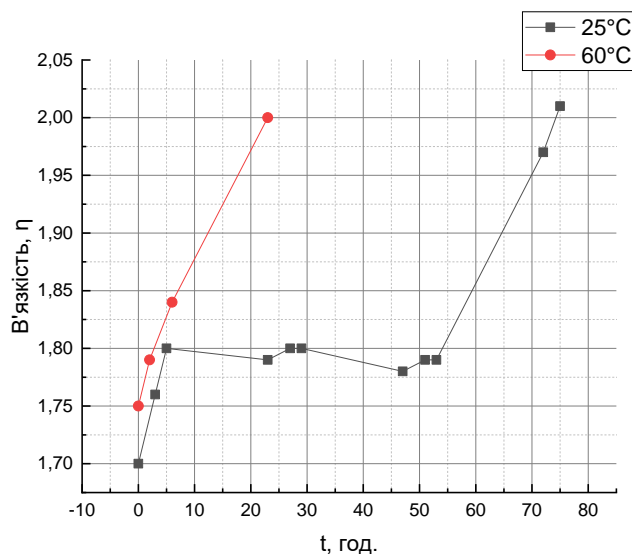


Рис. 6. Зміна в'язкості досліджуваних розчинів у процесі синтезу нанопоясів V2O5 для швидкості перемішування 200 об/хв при температурах суспензії 25°C та 60°C.

Fig. 6. Change of viscosity of the investigated solutions in the process of synthesis of V2O5 nanobelts at stirring speed of 200 rpm and at suspension temperatures of 25°C and 60°C.

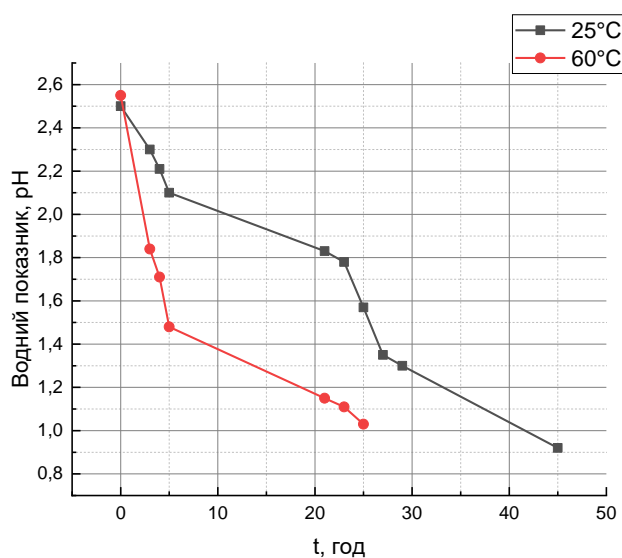


Рис. 7. Зміна водневого показника рН розчинів у процесі синтезу нанопоясів V2O5 для швидкості перемішування 500 об/хв при температурі суспензії 25°C та 60°C.

Fig. 7. Change of hydrogen index pH of solutions in the process of synthesis of V2O5 nanobelts at stirring speed of 500 rpm and at suspension temperatures of 25°C and 60°C.

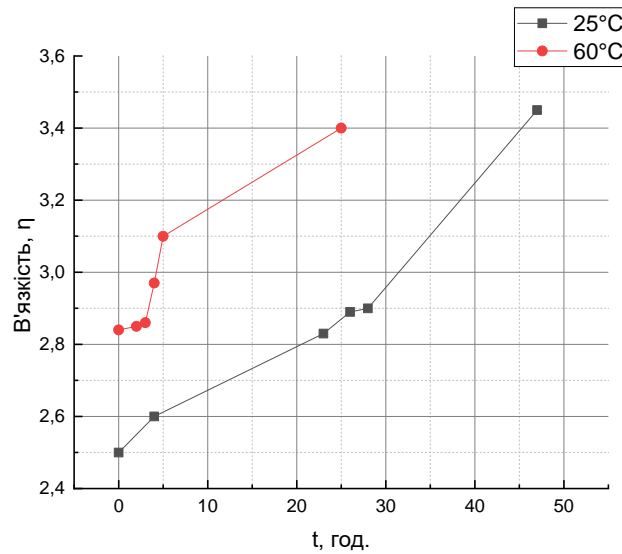


Рис. 8. Зміна в'язкості досліджуваних розчинів у процесі синтезу нанопоясів V2O5 для швидкості перемішування 500об/хв при температурах суспензії 25°C та 60°C.

Fig. 8. Change of viscosity of the investigated solutions in the process of synthesis of V2O5 nanobands at stirring speed of 500 rpm and at suspension temperaturei of 25°C and 60°C.

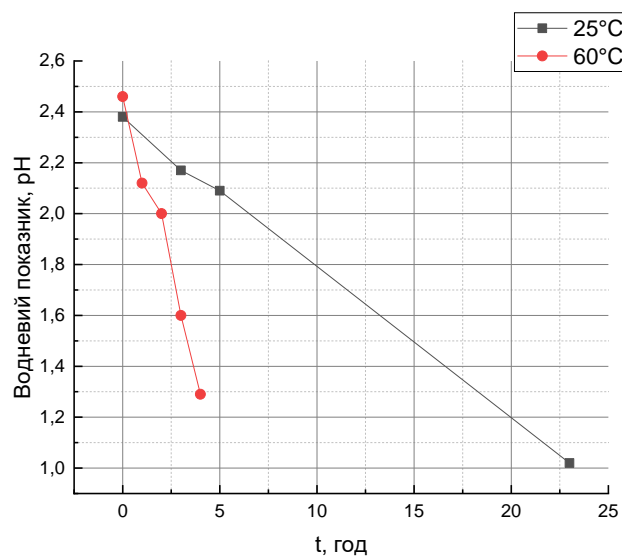


Рис. 9. Зміна водневого показника рН розчинів у процесі синтезу нанопоясів V2O5 для швидкості перемішування 800об/хв при температурах суспензії 25°C та 60°C.

Fig. 9. Change of hydrogen index pH of solutions in the process of synthesis of V2O5 nanobands at stirring speed of 800 rpm and at suspension temperatures of 25°C and 60°C.

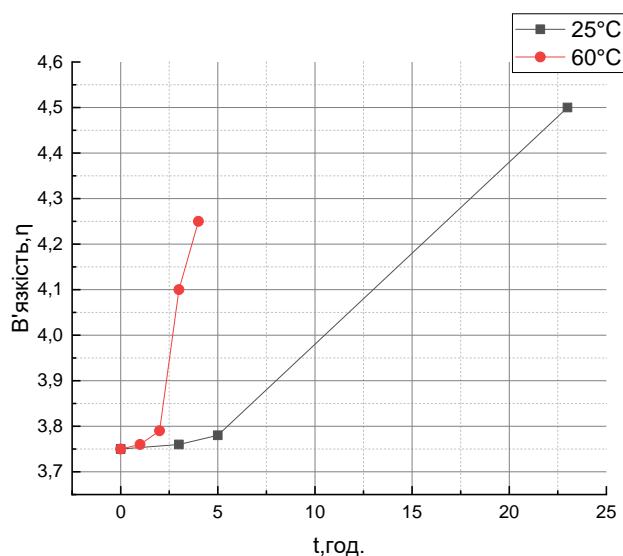


Рис. 10. Зміна в'язкості досліджуваних розчинів у процесі синтезу нанопоясів V2O5 для швидкості перемішування 800об/хв при температурах суспензії 25°C та 60°C.

Fig. 10. Change of viscosity of the investigated solutions in the process of synthesis of V2O5 nanobands at stirring speed of 800 rpm and at suspension temperatures of 25°C and 60°C.

Також було проведено цикл експериментів без перемішування (Рис. 11-12) та без додавання NaCl (Рис. 13-14) у суспензію. На рис. 11-12 представлені результати процесу повного перетворення 1 г. комерційного порошку V2O5 за 864 год. в наноструктури. На рис. 13-14 представлені результати впливу відсутності NaCl на претворення 10 г. комерційного порошку V2O5 при 500 об/хв. впродовж 1010 год.

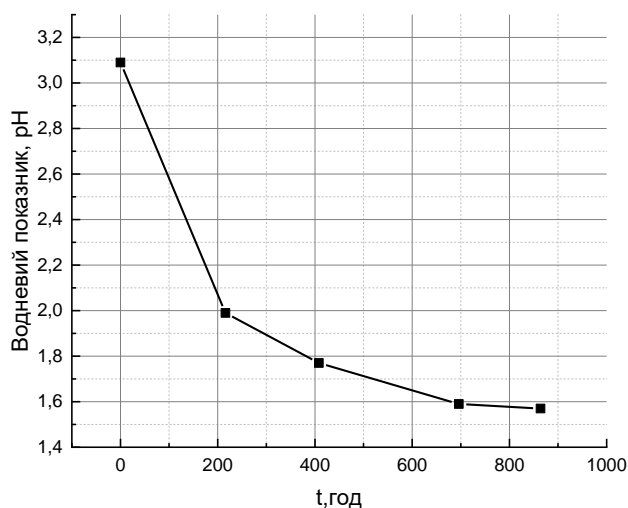


Рис. 11. Зміна водневого показника рН розчину у процесі перетворення в нанопояси без перемішування суспензії при температурі 25°C протягом 864 год.

Fig. 11. Change of hydrogen pH of the solution in the process of transformation into nanobands without stirring of the suspension at temperature 25°C for 864 hours.

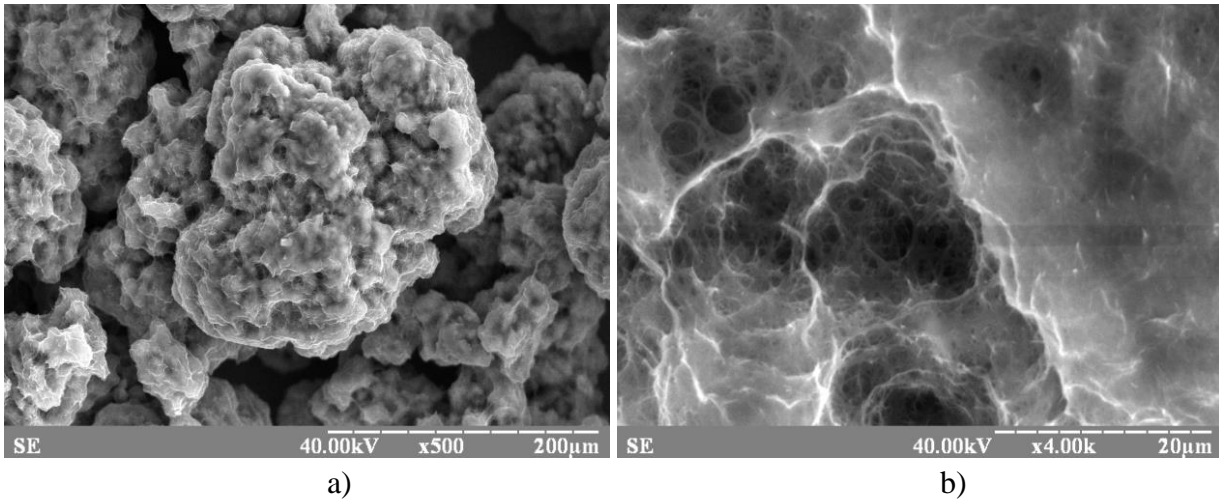


Рис. 12. РЕМ знімки процесу перетворення в нанопояски без інтенсивного перемішування суспензії при температурі 25 °С за 864 год (а, б).
 Fig. 12. SEM images of transformation into nanobelts without vigorous stirring of the suspension at temperature 25 °C for 864 hours (a, b).

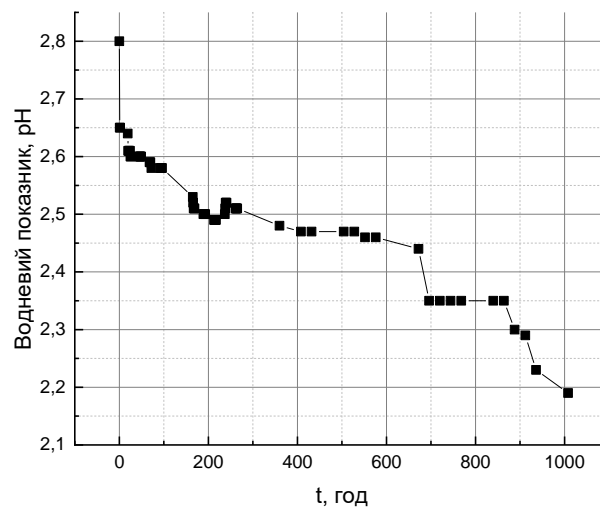


Рис. 13. Зміна водневого показника рН розчину у процесі синтезу нанопоясів V2O5 для швидкості перемішування 500об/хв при температурі суспензії 25°С протягом 1010 год.
 Fig. 13. Change of hydrogen pH of solution in the process of synthesis of V2O5 nanobands at stirring speed of 500 rpm and at suspension temperature of 25°C for 1010 hours.

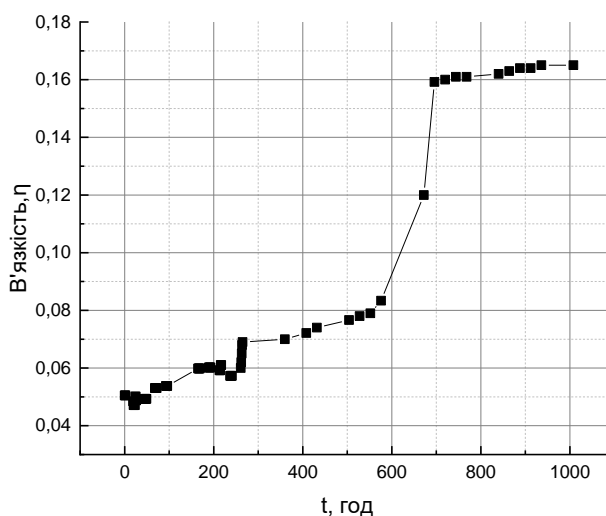


Рис. 14. Зміна в'язкості розчину у процесі синтезу нанопоясів V2O5 при швидкості перемішування 500 об/хв та температурі суспензії 25°C протягом 1010 год.

Fig. 14. The change in the viscosity of the solution during the synthesis of V2O5 nanobelts at a stirring speed of 500 rpm and a suspension temperature of 25°C for 1010 hours.

Було проведено дослідження впливу інтенсивності перемішування і складу суспензії на розчинність пентаоксиду ванадію, в якості показника було обрано електропровідність суспензії. На рис. 15-18 зображені графіки залежності зміни електропровідності від часу.

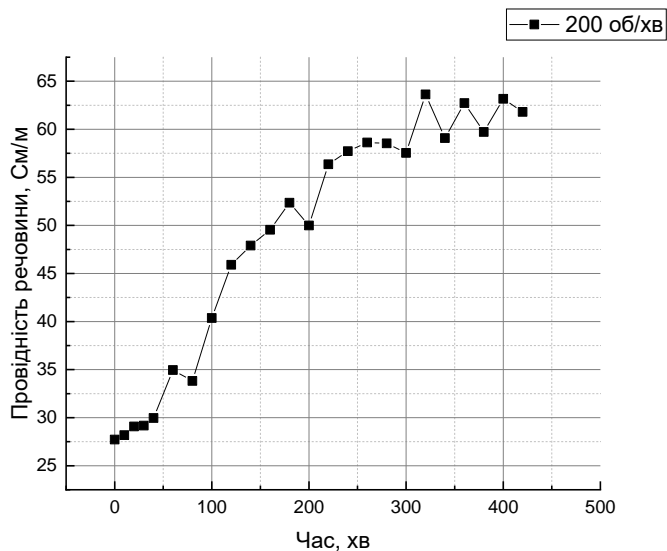


Рис. 15. Зміна електропровідності розчину у процесі інтенсивного перемішування (200 об/хв) 1 гр. порошку V2O5 при температурі суспензії 25°C.

Fig. 15. Change in the electrical conductivity of the solution during intensive mixing at 200 rpm of 1 gram of V2O5 powder at suspension temperature of 25°C.

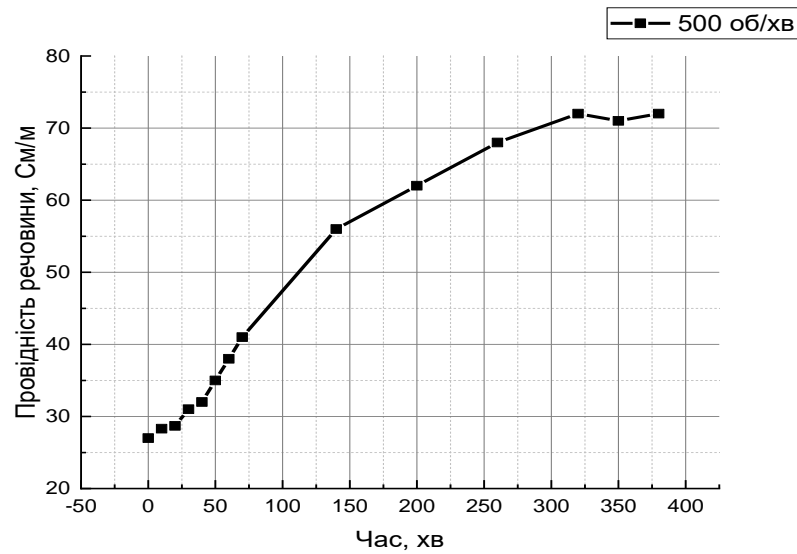


Рис. 16. Зміна електропровідності розчину у процесі інтенсивного перемішування (500 об/хв) 1 гр. порошку V2O5 при температурі суспензії 25°C.

Fig. 16. Change in the electrical conductivity of the solution during intensive mixing at 500 rpm of 1 gram of V2O5 powder and at suspension temperature of 25°C.

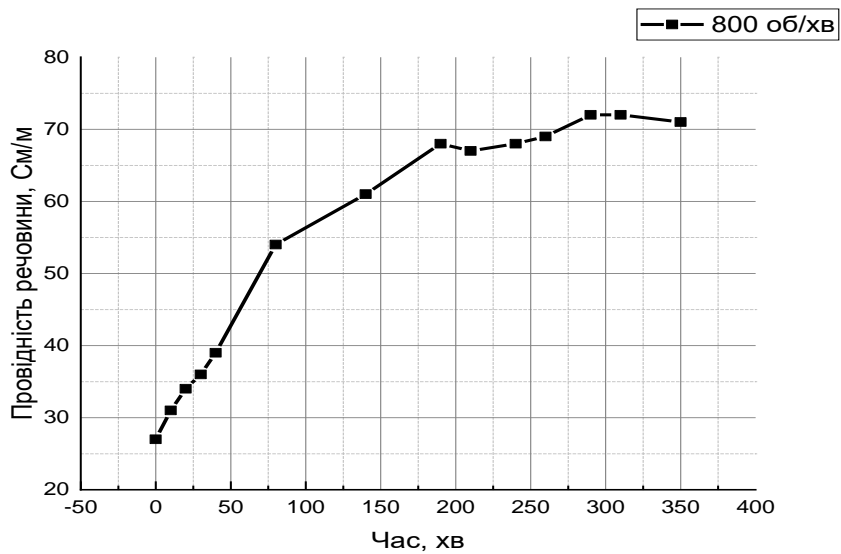


Рис. 17. Зміна електропровідності розчину у процесі інтенсивного перемішування (800 об/хв) 1 гр. порошку V2O5 та при температурі суспензії 25°C.

Fig. 17. Change in the electrical conductivity of the solution during intensive mixing (800 rpm) 1 gram of V2O5 powder and at a suspension temperature of 25°C.

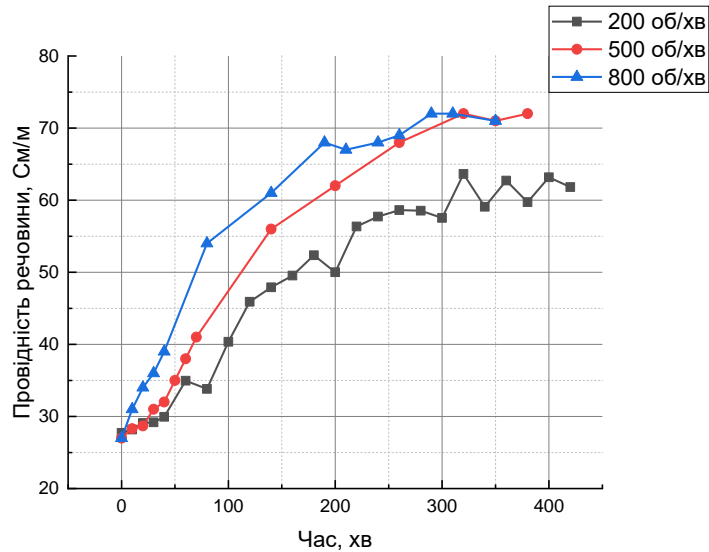


Рис. 18. Зведений графік зміни електропровідності розчину у процесі інтенсивного перемішування (200 об/хв ,500об/хв та 800об/хв) 1 гр. порошку V2O5 при температурі суспензії 25°C.

Fig. 18. Summary graph of changes in the electrical conductivity of the solution in the process of intensive mixing (200rpm, 500rpm and 800rpm) 1 gram of V2O5 powder and at suspension temperature of 25°C.

3. Застосування концепції балістичних стрибків до утворення видовжених наноструктур

Чисельна схема моделювання еволюції ансамблів нанопоясів базується на чисельному розв’язку методом Ейлера системи $3 * N_0$ диференціальних рівнянь для розмірів частинок із в’яззю у вигляді закону збереження речовини:

$$\begin{cases} \frac{dA_i}{d\tau} = r_a^{kinet} \left(\Delta - \frac{r_c^{therm}}{C_i} - \frac{r_b^{therm}}{B_i} - \frac{r_a^{bal}}{r_a^{kinet} J} \right) \\ \frac{dB_i}{d\tau} = r_b^{kinet} \left(\Delta - \frac{r_a^{therm}}{A_i} - \frac{r_c^{therm}}{C_i} - \frac{r_b^{bal}}{r_b^{kinet} J} \right) \\ \frac{dC_i}{d\tau} = r_c^{kinet} \left(\Delta - \frac{r_a^{therm}}{A_i} - \frac{r_b^{therm}}{B_i} - \frac{r_c^{bal}}{r_c^{kinet} J} \right) \end{cases} \quad (1)$$

$$1 \leq i \leq N_0$$

$$\begin{aligned} & (x_{eq} + \Delta(t)) \left(1 - \frac{\sum_i^{N(t)} A_i B_i C_i}{\tilde{v}^{total}} \right) + \frac{\sum_i^{N(t)} A_i B_i C_i}{\tilde{v}^{total}} = \\ & = (x_{eq} + \Delta(t=0)) \left(1 - \frac{\sum_i^{N(0)} A_{i0} B_{i0} C_{i0}}{\tilde{v}^{total}} \right) + \frac{\sum_i^{N(0)} A_{i0} B_{i0} C_{i0}}{\tilde{v}^{total}} \end{aligned} \quad (2)$$

Рівняння типу (1) були введені в статтях [6-8] і враховують як термічні приєднання-від’єднання атомів (іонів), так і балістичну анізотропну ерозію з різних граней внаслідок інтенсивного перемішування. Безрозмірний параметр J характеризує інтенсивність перемішування.

Пересичення $\Delta(t)$ перераховується на кожному кроці по часу з рівняння (2). Початкові умови:

$$\begin{aligned} N_0 &= 200000, \\ A_0 &= B_0 = C_0 = 200, \\ \tilde{V}^{total} &= N * A_0 * B_0 * C_0 * 100. \end{aligned}$$

Початкове пересичення:

$$\Delta(t = 0) = 0.01.$$

Початковий розкид розмірів:

$$\begin{aligned} A_i &= A_0 * \ln(1/\text{random}), \\ B_i &= B_0 * \ln(1/\text{random}), \\ C_i &= C_0 * \ln(1/\text{random}). \end{aligned}$$

При моделюванні кінетики зміни розмірів ансамблю наночастинок, як тільки один із розмірів стає меншим або рівним нулю, частинка вважається зниклою і кількість частинок зменшується на одиницю. З часом більшість усереднених параметрів системи (середній об'єм, середні розміри, площа, кількість частинок, що зменшується у результаті коалесценції) асимптотично виходять на степеневі залежності, показники яких залежать від асиметрії ерозії та від інтенсивності перемішування. Показники степеневих залежностей відповідних параметрів приведені в таблиці 1 та в таблиці 2.

Таблиця 1

Асимптотичні показники степеневих залежностей середніх по ансамблю величин об'єму частинки v , лінійних розмірів (a , b , c), пересичення d , кількості частинок n в ансамблі та повної площі p . Параметри: $r_a^{therm} = r_b^{therm} = r_c^{therm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = r_b^{bal} = r_c^{bal} = 1$.

Table 1

Asymptotic indicators of power dependences of the average ensemble values of particle volume v , linear dimensions (a , b , c), supersaturation d , number of particles n in the ensemble and total area p . Parameters: $r_a^{therm} = r_b^{therm} = r_c^{therm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = r_b^{bal} = r_c^{bal} = 1$.

	$j=0$	$j=0.002$	$j=0.004$	$j=0.006$	$j=0.006$
v	1,17799	1,17418	1,16867	1,15856	1,15456
a	0,39403	0,39452	0,39558	0,38044	0,37816
b	0,39446	0,39306	0,39131	0,38154	0,37996
c	0,39259	0,39208	0,39141	0,3855	0,38354
d	-0,40443	-0,21085	-0,14324	-0,10897	-0,08908
n	-1,12823	-1,11776	-1,10358	-1,0809	-1,05861
p	-0,34047	-0,33193	-0,32059	-0,31067	-0,29123

Таблиця 2

Асимптотичні показники степеневих залежностей середніх по ансамблю величин об'єму частинки v , лінійних розмірів (a, b, c) , пересичення d , кількості частинок n в ансамблі та повної площі p . Параметри: $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1, r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1,$
 $r_a^{bal} = \frac{1}{2}; r_b^{bal} = \sqrt{2}; r_c^{bal} = \sqrt{2}.$

Table 2

Asymptotic indicators of power dependences of the average ensemble values of particle volume v , linear dimensions (a, b, c) , supersaturation d , number of particles n in the ensemble and total area p . Parameters: $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1, r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1,$
 $r_a^{bal} = \frac{1}{2}; r_b^{bal} = \sqrt{2}; r_c^{bal} = \sqrt{2}.$

	$j=0$	$j=0.002$	$j=0.004$	$j=0.006$	$j=0.008$
v	1,17799	1,25359	1,36573	1,44414	1,53739
a	0,39403	0,64191	0,80326	0,88527	0,94017
b	0,39446	0,32247	0,30907	0,2975	0,31707
c	0,39259	0,31992	0,30776	0,29887	0,32287
d	-0,40443	-0,17418	-0,09191	-0,05467	-0,03938
n	-1,12823	-1,20143	-1,31354	-1,38962	-1,46779
p	-0,34047	-0,32486	-0,30795	-0,30062	-0,29067

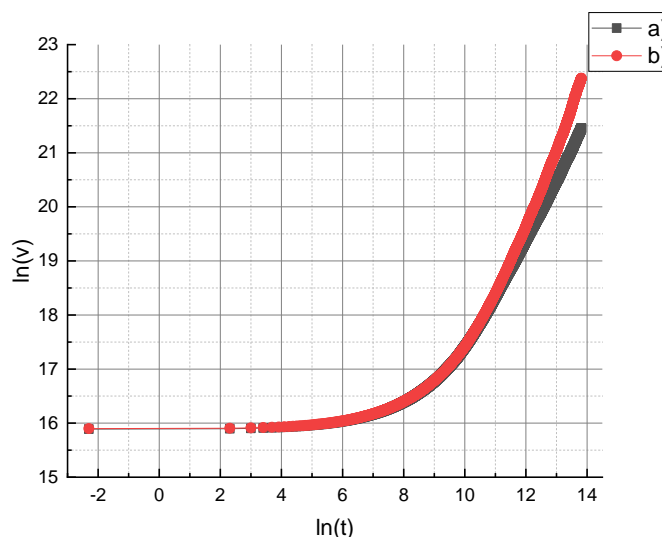


Рис. 19. Залежність середньої величини об'єму частинки v від часу, при параметрах $j=0.008$,

- a) $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1, r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1, r_a^{bal} = r_b^{bal} = r_c^{bal} = 1,$
 b) $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1, r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1, r_a^{bal} = \frac{1}{2}; r_b^{bal} = \sqrt{2}; r_c^{bal} = \sqrt{2}.$

Fig. 19. Dependence of the average particle volume v on time at parameters $j=0.008$,

- a) $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1, r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1, r_a^{bal} = r_b^{bal} = r_c^{bal} = 1,$
 b) $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1, r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1, r_a^{bal} = \frac{1}{2}; r_b^{bal} = \sqrt{2}; r_c^{bal} = \sqrt{2}.$

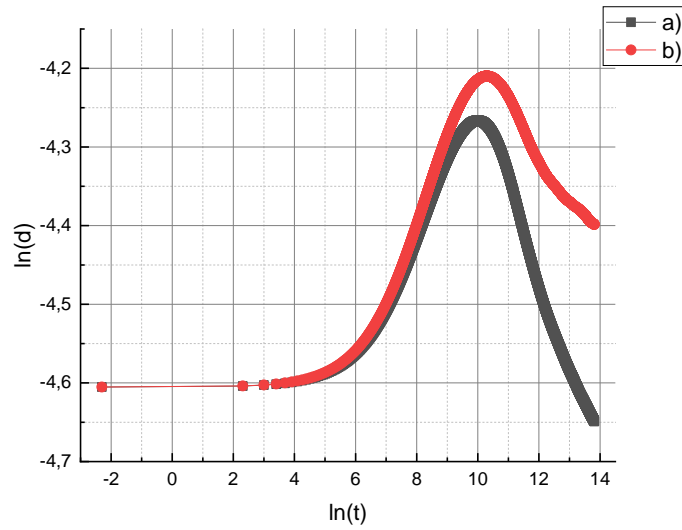


Рис. 20. Залежність середньої величини пересичення d від часу, при параметрах $j=0.008$,

- a) $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = r_b^{bal} = r_c^{bal} = 1$,
 b) $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = \frac{1}{2}$; $r_b^{bal} = \sqrt{2}$; $r_c^{bal} = \sqrt{2}$.

Fig. 20. The dependence of the average value of supersaturation d on time at parameters $j=0.008$,

- a) $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = r_b^{bal} = r_c^{bal} = 1$,
 b) $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = \frac{1}{2}$; $r_b^{bal} = \sqrt{2}$; $r_c^{bal} = \sqrt{2}$.

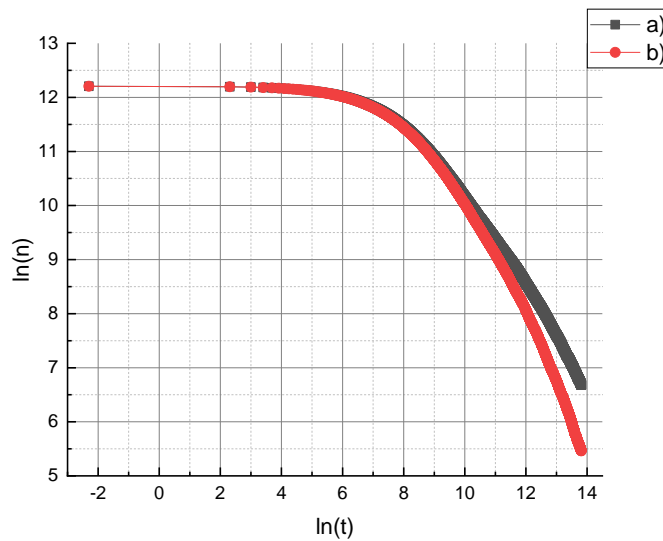


Рис. 21. Залежність величини кількості частинок n від часу, при параметрах $j=0.008$,

- a) $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = r_b^{bal} = r_c^{bal} = 1$,
 b) $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = \frac{1}{2}$; $r_b^{bal} = \sqrt{2}$; $r_c^{bal} = \sqrt{2}$.

Fig. 21. The dependence of the number of particles n on time at parameters $j=0.008$,

- a) $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = r_b^{bal} = r_c^{bal} = 1$,
 b) $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = \frac{1}{2}$; $r_b^{bal} = \sqrt{2}$; $r_c^{bal} = \sqrt{2}$.

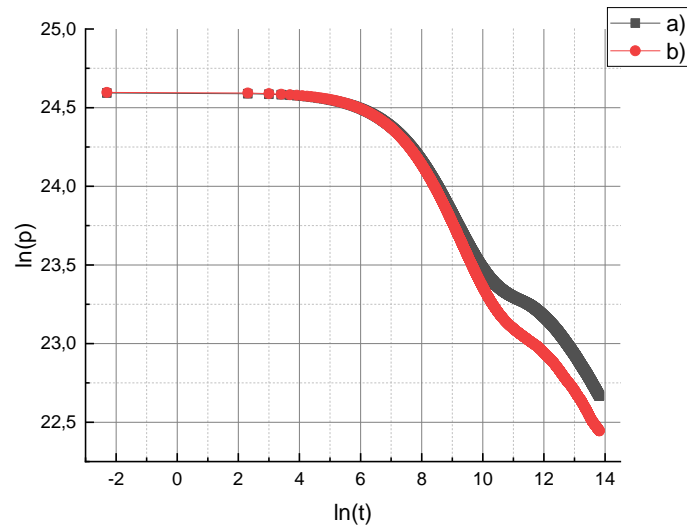


Рис. 22. Залежність величини повної площі частинок p від часу, при параметрах $j=0.008$,

- a) $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = r_b^{bal} = r_c^{bal} = 1$,
 b) $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = \frac{1}{2}$; $r_b^{bal} = \sqrt{2}$; $r_c^{bal} = \sqrt{2}$.

Fig. 22. The dependence of the total area of particles p on time at parameters $j=0.008$,

- a) $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = r_b^{bal} = r_c^{bal} = 1$,
 b) $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = \frac{1}{2}$; $r_b^{bal} = \sqrt{2}$; $r_c^{bal} = \sqrt{2}$.

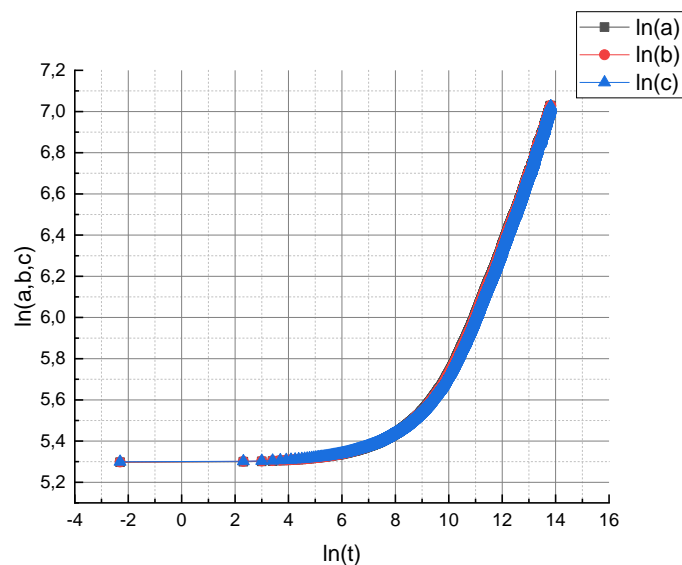


Рис. 23. Залежність середніх величин частинок (a, b, c) від часу, при параметрах $j=0.008$,

- $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = r_b^{bal} = r_c^{bal} = 1$.

Fig. 23. Dependence of average values of particles (a, b, c) on time at parameters $j=0.008$,

- $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = r_b^{bal} = r_c^{bal} = 1$.

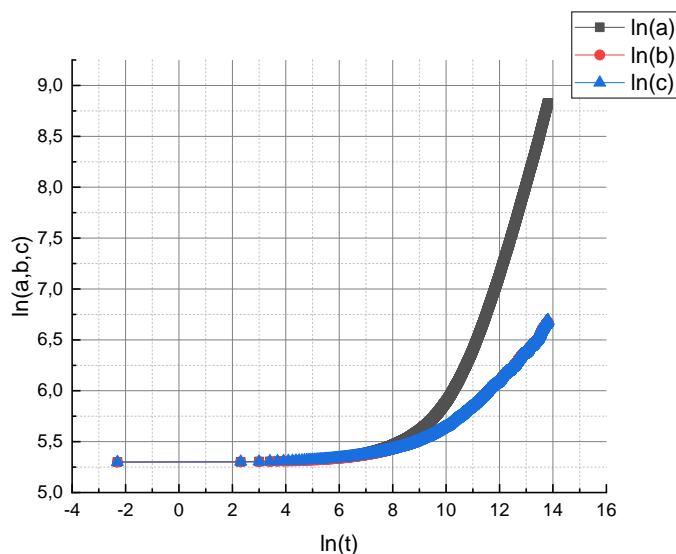


Рис. 24. Залежність середніх величин частинок (a, b, c) від часу, при параметрах $j=0.008$,
 $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = \frac{1}{2}$; $r_b^{bal} = \sqrt{2}$; $r_c^{bal} = \sqrt{2}$.

Fig. 24. Dependence of average values of particles (a, b, c) on time at parameters $j=0.008$,
 $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = \frac{1}{2}$; $r_b^{bal} = \sqrt{2}$; $r_c^{bal} = \sqrt{2}$.

4. Висновки

У роботі проведено експериментальне дослідження процесу синтезу нанопоясів пентаоксиду ванадію методом інтенсивного перемішування суспензії вихідного порошку у водному розчині NaCl. Встановлена кореляція еволюції ансамблів нановолокон пентаоксиду ванадію з динамікою зміни кислотності і в'язкості суспензії.

Виявлено, що характерною особливістю процесу структурного перетворення частинок у нанопояски V_2O_5 є зменшення водневого показника pH розчину, що може бути використано як індикативну інтегральну характеристику швидкості процесу синтезу нанопоясів пентаоксиду ванадію при промисловому виробництві.

Варто зазначити, що важливими чинниками, які можуть критично впливати на процес синтезу наноструктур при інтенсивному перемішуванні є склад суспензії, її температура, швидкість перемішування. Процес синтезу нанострічок V_2O_5 різко прискорюється інтенсивним перемішуванням та збільшенням температури.

Для опису процесу утворення видовжених наноструктур застосовано нову феноменологічну теорію перекристалізації з урахуванням додаткових анізотропних балістичних (нетермічних) частот від'єднання структурних одиниць від різних граней при інтенсивному перемішування. Отримані результати комп'ютерного моделювання відповідають експериментальним даним – великий ступінь витягнутості поясів після тривалого перемішування та приблизно лінійна залежність середньої довжини від інтенсивності перемішування.

Список використаної літератури:

1. Xianhong R. Ambient dissolution-recrystallization towards large-scale preparation of V_2O_5 nanobelts for high-energy battery applications / R. Xianhong, T. Yuxin, O. Malyi, A. Gusak, Zhang Y. // Journal of Nano Energy. – 2016. – V. 22. – P. 583-593. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2016.03.001>

2. Tang Y. Mechanical Force Driven Growth of Elongated Bending TiO₂ based Nanotubular Materials for Ultrafast Rechargeable Lithium Ion Batteries / Y. Tang, Y. Zhang, J. Deng, J. Wei // *Advanced Materials*. – 2014. – V. 26. – P. 6111-6118. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1002/adma.201402000>
3. Wang Z. L. Nanobelts, Nanowires, and Nanodiskettes of Semiconducting Oxides – From Materials to Nanodevices / Z. L. Wang // *Advanced Materials*. – 2003. – V. 15. – P. 432-436. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1002/adma.200390100>
4. Wei Pan Z. Nanobelts of Semiconducting Oxides / Z. Wei Pan, Z. Rong Dai, Z. Lin Wang // *Science*. – 2001. – V. 291. – P. 1947-1949. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1126/science.1058120>
5. Lee M. One-step hydrothermal synthesis of graphene decorated V₂O₅ nanobelts for enhanced electrochemical energy storage / M. Lee, S. K. Balasingam, H. Y. Jeong, Won G. Hong, Han-Bo-Ram Lee, B.yung H. Kim & Y. Jun // *Scientific Reports*. – 2015. – V. 8151– Режим доступу: <https://doi.org/10.1038/srep08151>
6. Gusak A. M. Application of ballisticjumps concept to formation of non-equilibrium anisotropic structures and to severe plastic deformation/, Y.I. Huriev, D.S. Gertsricken. // *Cherkasy University Bulletin: Physical and Mathematical Sciences*, . –2020. –P. 3-16. – Режим доступу: <https://doi.org/10.31651/2076-5851-2020-1-3-16>
7. Gusak A. M. Elementary models of the “flux driven anti-ripening” during nanobelt growth / A. M. Gusak, Y. I. Huriev, O. I. Malyi, Y. Tang. // *Physical Chemistry Chemical Physics*. –2020.–V. 22, No17.–P. 9740–9748.–Режим доступу:<https://doi.org/10.1039/C9CP06337D>
8. Gusak A. M. Anisotropic Nucleation, Growth and Ripening under Stirring—A Phenomenological Model / A. M. Gusak, Y. Huriev, J. W. Schmelzer. // *Entropy*. –2020. –V. 22, No11. –P. 1254. – Режим доступу: <https://doi.org/10.3390/e22111254>

References:

1. R. Xianhong, T. Yuxin, O. Malyi, A. Gusak, Y. Zhang. (2016) Ambient dissolution-recrystallization towards large-scale preparation of V₂O₅ nanobelts for high-energy battery applications. *Journal of Nano Energy*. , 22, 583-593. – Retrieved from: <https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2016.03.001>
2. Y. Tang, Y. Zhang, J. Deng, J. Wei. (2014) Mechanical Force Driven Growth of Elongated Bending TiO₂ based Nanotubular Materials for Ultrafast Rechargeable Lithium Ion Batteries. *Advanced Materials*., 26, 6111-6118. – Retrieved from <https://doi.org/10.1002/adma.201402000>
3. Z. L. Wang. (2003) Nanobelts, Nanowires, and Nanodiskettes of Semiconducting Oxides – From Materials to Nanodevices. *Advanced Materials*., 15, 432-436. – Retrieved from <https://doi.org/10.1002/adma.200390100>
4. Z. Wei Pan, Z. Rong Dai, Z. Lin Wang. (2001) Nanobelts of Semiconducting Oxides. *Science*., 291, 1947-1949. – Retrieved from <https://doi.org/10.1126/science.1058120>
5. M. Lee, S. K. Balasingam, H. Y. Jeong, Won G. Hong, Han-Bo-Ram Lee, B.yung H. Kim & Y. Jun. (2015) One-step hydrothermal synthesis of graphene decorated V₂O₅ nanobelts for enhanced electrochemical energy storage. *Scientific Reports*., 8151– Retrieved from <https://doi.org/10.1038/srep08151>
6. A. M. Gusak, Y.I. Huriev, D.S. Gertsricken. (2020) Application of ballisticjumps concept to formation of non-equilibrium anisotropic structures and to severe plastic

deformation *Cherkasy University Bulletin: Physical and Mathematical Sciences*, 1, 3-16. – Retrieved from <https://doi.org/10.31651/2076-5851-2020-1-3-16>

7. Gusak, A. M., Huriev, Y. I., Malyi, O. I., & Tang, Y. (2020). Elementary models of the “flux driven anti-ripening” during nanobelt growth. *Physical Chemistry Chemical Physics.*, 22(17), 9740-9748. – Retrieved from <https://doi.org/10.1039/C9CP06337D>

8. Gusak, A. M., Huriev, Y. I., & Schmelzer, J. W. (2020). Anisotropic Nucleation, Growth and Ripening under Stirring—A Phenomenological Model. *Entropy.*, 22(11), 1254. – Retrieved from <https://doi.org/10.3390/e22111254>

D. I. Kolomiets

PhD student of the Department of Physics, The Bohdan Khmelnytsky National University of Cherkasy, Cherkasy, Ukraine,
denyskolomiets95@gmail.com

M. O. Pasichnyy

Candidate of physical and mathematical sciences, associate professor, Head of the Department of Physics, The Bohdan Khmelnytsky National University of Cherkasy, Cherkasy, Ukraine,
pasichnyy@ukr.net

SYNTHESIS OF VANADIUM OXIDE NANOBELTS AND THE APPLICATION OF THE CONCEPT OF BALLISTIC JUMPS FOR THE DESCRIPTION OF THEIR FORMATION

Summary. *The process of synthesis of vanadium pentoxide nanobelts during intensive stirring of a suspension of commercial powder V₂O₅ in an aqueous solution of NaCl was investigated. The application of the concept of ballistic jumps to describe the formation of anisotropic structures in non-equilibrium systems under the influence of external factors is considered. The effect of temperature and stirring intensity on the process of synthesis of vanadium pentoxide nanobelts is demonstrated.*

The correlation between the evolution of nanobelts ensemble of vanadium pentoxide and the dynamics of changes in hydrogen index pH and viscosity of the suspension was established. It was found that a characteristic feature of the process of structural transformation of particles V₂O₅ into nanobelts is a decrease in the hydrogen index pH of the solution, which can be used as an indicative integral characteristic of the rate of the synthesis of vanadium pentoxide nanobelts during industrial production.

It is worth noting that the composition of the suspension, its temperature, and the speed of mixing are important factors that can critically affect the process of synthesis of nanostructures under intensive mixing. The process of synthesis of V₂O₅ nanobelts is sharply accelerated by intensity of stirring and increasing temperature. To describe the process of formation of elongated nanostructures, a new phenomenological theory of recrystallization taking into account additional anisotropic ballistic frequencies of detachment of structural units from different faces during intensive mixing is applied. The obtained results of computer modeling correspond to the experimental data - a large degree of elongation of the belts after

long-term mixing and an approximately linear dependence of the average length on the intensity of mixing.

Keywords: nanostructures, nanobelts, metal oxides, vanadium pentoxide, nonequilibrium systems, ballistic jumps.

Одержано редакцією 10.08.2021

Прийнято до друку 10.09.2021

ORCID: 0000-0003-1555-3831

Н. В. Сторожук

Кандидат фіз.-мат. наук,
Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького,
Черкаси, Україна, nadushenka@ukr.net

ORCID: 0000-0002-2594-5559

А. М. Гусак

Доктор фіз.-мат. наук, професор,
Заслужений діяч науки і техніки України,
Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького,
Черкаси, Україна, amgusak@ukr.net

УДК 538.9

PACS 66.30.-h

DOI: 10.31651/2076-5851-2021-31-43

ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДУ SKMF ДО МОДЕЛЮВАННЯ ВЗАЄМНОЇ ТА РЕАКЦІЙНОЇ ДИФУЗІЇ В ПОТРІЙНИХ СПЛАВАХ³

Нещодавно розроблена авторська модифікація середньопольового методу опису реакційної дифузії та конкуренції проміжних фаз узагальнена з випадку бінарних систем на потрійні сплави (тверді розчини, впорядковані проміжні фази та двофазні зони). При цьому враховується взаємодія між атомами у двох координаційних сферах. Для відпрацювання методу температура та енергії взаємодії підібрані так, щоб на двох сторонах (AB і BC) концентраційного трикутника було по одній проміжній упорядкованій фазі з вузьким інтервалом гомогенності, а на третій стороні (AC) була повна розчинність. Досліджені вибір дифузійного шляху та кінетика взаємної дифузії, впорядкування та росту проміжних фаз, в залежності від складу вихідної дифузійної пари.

Ключові слова: дифузія, фазоутворення, ріст, упорядкування, діаграми стану, потрійні системи, дифузійні траєкторії, конкуренція фаз.

1. Вступ

Процеси взаємної дифузії у сплавах із утворенням і ростом проміжних фаз є актуальною задачею фізичного матеріалознавства, розв'язання якої необхідно для

³ Робота виконана при підтримці МОН України.