

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Алтайский государственный университет
Восточно-Казахстанский государственный университет им. С.
Аманжолова
Восточно-Казахстанский государственный технический
университет им. Д. Серикбаева

Новые материалы и технологии

Сборник научных статей
VI Российско-Казахстанской молодежной научно-технической
конференции

Барнаул
2018

ББК 30.3

Н 766

Редакционная коллегия

В.В. Поляков, д.ф.-м.н., профессор, декан физико-технического факультета, заведующий кафедрой прикладной физики, электроники и информационной безопасности

В.А. Плотников, д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой общей и экспериментальной физики

Ответственные за выпуск:

Н.Н. Мирзабекян – начальник научно-организационного отдела АлтГУ

Н 766 Новые материалы и технологии: сборник научных статей VI Российско-Казахстанской молодежной научно-технической конференции. Барнаул, 13 декабря 2018 г. – Барнаул: Изд-во Алт. гос. ун-та, 2018. - 178 с.

ISBN 978-5-7904-2323-9

В сборнике статей VI Российско-Казахстанской молодежной научно-технической конференции представлены доклады посвященные технологиям получения новых материалов, структуре и процессам формирования структурно-фазового состояния. В докладах отражены современные тенденции развития науки о материалах, где проявился интерес молодых исследователей.

ISBN 978-5-7904-2323-9

© ФГБОУ ВО «Алтайский
государственный университет»,
2018

Обращение к читателю

Сборник научных статей VI Российско-Казахстанской молодежной научно-технической конференции посвящен анализу результатов исследований, проведенными молодыми учеными, аспирантами, магистрантами и их научными руководителями в области физического материаловедения. География авторов статей охватывает Республику Казахстан, Республику Беларусь, Россию. Города Барнаул, Новосибирск, Томск, Новокузнецк, Красноярск, Уфа, Усть-Каменогорск, Семипалатинск, Могилев. Тематика статей отражает научные интересы молодых исследователей к активно развивающимся современным областям физики материалов, затрагивающие как фундаментальные, так и прикладные аспекты.

Ряд статей посвящен фундаментальным проблемам физики конденсированного состояния. В этих статьях изучается поведение дискретных брызгов, атомные механизмы миграции и роста зерен в металлах, особенности деформационного поведения углеродных нанотрубок, поведение делокализованной нелинейной моды в решетке графена.

Широко представлены работы, в которых анализируется структурно-фазовое состояние частиц детонационного наноалмаза. В этих статьях затрагиваются проблемы атомной конфигурации кристаллической решетки наночастицы алмаза, исследуется проблема теплопроводности. Приведены методики термобарического синтеза алмазных кристаллов и особенности работы установки по термобарическому воздействию на углеродные материалы.

Целый ряд работ посвящен проблемам деформационного поведения металлов и сплавов и акустической эмиссии, сопровождающей деформацию металлических материалов. В этих статьях акустическая эмиссия выступает и как метод исследования (*in situ* метод), и как объект исследования, физика которого в настоящее время остается не до конца выясненной.

Целый комплекс работ представляет собой технологический задел, имеющий большое прикладное значение. В этих работах анализируются проблемы получения упрочняющих и защитных покрытий, влияние тлеющего разряда на механические свойства металлической поверхности изделия, проблемы мартенситных превращений в никелиде титана, лежащих в основе эффектов памяти формы и сверхэластичности.

Статьи опубликованы в авторской редакции и оформлении.

Оргкомитет выражает благодарность всем авторам, приславшим свои работы в сборник.

СТРУКТУРНОЕ СОСТОЯНИЕ ТЕРМОБАРИЧЕСКИ СПЕЧЁННОГО ДЕТОНАЦИОННОГО НАНОАЛМАЗА

Московкина А.К., Богданов А.С., Богданов Д.Г.

Алтайский государственный университет, Барнаул, Россия

E-mail: nastja.mak@yandex.ru

Научный руководитель Макаров С.В.

Введение

Детонационный наноалмаз – это продукт детонации углеродсодержащих взрывчатых веществ, прошедший стадию очистки. Алмазы обладают уникальными физико-химическими свойствами, которые связаны с особенностью их кристаллической решетки. К наиболее значимым свойствам, как правило, относят высокую твердость и износостойкость. Благодаря этим свойствам алмазы широко используются в практике.

Наноалмазы, образующиеся при детонации взрывчатых веществ из углерода входящего в их состав, являются особым типом алмазных материалов. Для детонационного наноалмаза характерна аномально высокая удельная площадь поверхности, достигающая 300 – 500 м²/г [1]. Согласно общим представлениям каждая частица наноалмаза состоит из алмазного наноядра и окружающими его примесями из неалмазных форм углерода и различного рода функциональных групп [2,3]. Состав и количественные характеристики примесей зависят от процесса синтеза.

Свойства наноалмазов детонационного синтеза зависят от многих параметров. Эти параметры связаны как с технологией получения, так и с методами последующего выделения (очистки) наноалмазов из продуктов взрыва. К параметрам, относящимся к технологии получения, можно отнести: состав взрывчатого вещества из которого синтезируют наноалмазы, элементный состав камеры, в которой происходит детонация взрывчатых веществ, состав среды охлаждения продуктов детонации (инертные газы, вакуум, углекислый газ, вода или ледяная оболочка) [4]. Параметры, связанные с технологией очистки, напрямую зависят от методов очистки и веществ участвующих в процессе выделения наноалмазов из конденсированного углерода.

В данной статье проведены рентгеноструктурные исследования и изучено структурное состояние детонационного наноалмаза.

Методика и материалы

Для изучения был взят порошок детонационного наноалмаза типа «УДА-С», изготовленный по техническим условиям ТУ 84-112-87 на предприятии ФГУП ФНПЦ «Алтай».

Термобарическое спекание наноалмазов осуществлялось на беспрессовом аппарате «разрезная сфера» (БАРС) в Институте геологии и минералогии СО РАН [5]. Спекание проводилось при давлении 5 ГПа и температурах 1100, 1200 и 1500 °С. Время термобарического воздействия при достижении максимальных параметров спекания составляло 60 секунд и 15 минут. В процессе термобарического воздействия порошок находился в полуспеченной оксидной втулке из MgO. После спекания образец очищался от втулки механически и с помощью кислоты.

Фазовый состав и структурное состояние нанокристаллических алмазных материалов исследовались с использованием рентгеновской дифракции на дифрактометре ДРОН-3 [6].

Экспериментальные результаты

На рис. 1 представлена рентгенограмма исходного детонационного наноалмаза (рис. 1.1) и рентгенограмма наноалмазного материала (рис. 1.2), полученного спеканием наноалмазного порошка при давлении $p = 5$ ГПа и температуре $T = 1100$ °С.

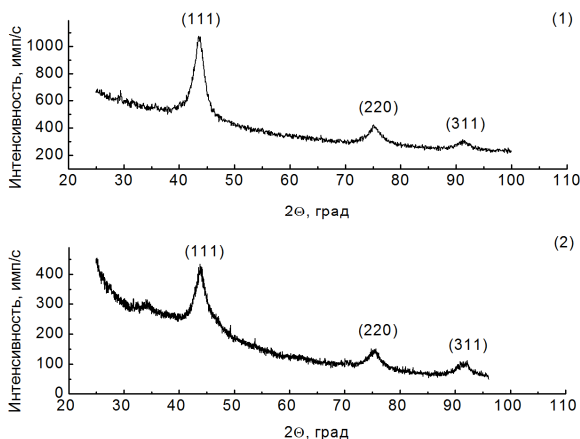


Рис. 1. Рентгенограмма детонационного наноалмаза:

(1) - исходного наноалмазного порошка,

(2) - спеченного при давлении $p = 5$ ГПа и температуре 1100 °С.

Цифрами в круглых скобках отмечены рефлексы алмаза.

Система рефлексов идентифицирована как система рефлексов углерода с кристаллической решеткой алмаза. Как следует из полученных данных, рефлекс исходного детонационного наноалмаза и после термобарического спекания имеют аномальное уширение. Анализ уширения рефлексом позволил определить размеры областей когерентного рассеяния, то есть определить размер нанокристаллов детонационного алмаза в исходном порошке и в спеченных поликристаллических агрегатах. Результаты расшифровок рентгенограмм, проведенных по известным методикам [7], исходного детонационного наноалмаза и спеченных образцов представлены в табл. 1.

Таблица 1.

Значения физического уширения и положения основных рефлексов наноалмаза исходного порошка в структуре спеченных образцов

hkl	Образец исходного порошка			Образец спеченный при p = 5 ГПа, T = 1100 °C		
	2θ, град	d, Å	β, град	2θ, град	d, Å	β, град
111	43,61	2,07	2,11	43,8	2,07	1,68
220	75,13	1,26	2,45	75,2	1,26	1,92
311	91,15	1,07	2,78	91,4	1,07	2,96

Продолжение таблицы 1

hkl	Образец спеченный при p = 5 ГПа, T=1200 °C			Образец спеченный при p = 5 ГПа, T = 1500 °C		
	2θ, град	d, Å	β, град	2θ, град	d, Å	β, град
111	43,56	2,07	1,78	43,72	2,07	1,81
220	75,2	1,26	1,74	74,96	1,26	1,84
311				91,16	1,07	2,01

При расчете областей когерентного рассеяния использовали упрощенный подход, согласно которому напряжения второго рода можно не учитывать, а уширение рентгеновских рефлексов обусловлено в основном малыми размерами частиц детонационного алмаза [7]:

$$D = \frac{\lambda}{\beta \cos \theta}.$$

Здесь D – размер частиц, λ – длина волны рентгеновского излучения, β – уширение рентгеновского рефлекса, θ – угол дифракции.

Результаты расчета размеров зон когерентного рассеяния рентгеновского излучения представлены в табл. 2.

Таблица 2.

Размеры кристаллов исходного детонационного наноалмаза и после термобарического спекания

Образец	Исходный наноалмаз	После термобарического спекания		
		P = 5 ГПа T = 1100 °C	P = 5 ГПа T = 1200 °C	P = 5 ГПа T = 1500 °C
Размер ОКР, нм	4,5±0,4	4,9±0,3	5,2±0,5	5,3±0,4

Согласно приведенным в табл. 2 данным размеры кристаллов детонационного наноалмаза до спекания составляют 4,5 нм, что хорошо согласуется с общепринятым данными [8,9]. После термобарического воздействия наблюдается незначительный рост кристаллов. Так, в образце, спеченном при давлении 5 ГПа и температуре 1100 °C, размер кристаллов наноалмаза равен 4,9 нм, в образце, спеченном при том же значении давления при температуре 1200 °C, кристаллы наноалмаза выросли до 5,2 нм, а в образце, спеченном также при 5 ГПа и температуре 1500 °C, размер составляет 5,3 нм.

Рентгенофазовый анализ образцов не выявил в структуре композиционных материалов другой кристаллической фазы углерода кроме алмазной фазы. Следовательно, термобарическое воздействие при выбранных параметрах спекания детонационного наноалмаза не приводит к существенному обратному фазовому переходу алмаза в графит.

В заключение хотелось бы отметить, что используя метод термобарического спекания, можно получить компактные высокопрочные образцы с уникальными свойствами: микротвёрдостью, размером кристаллов и теплопроводностью.

В ходе термобарического спекания исходные нанокристаллы с размером 4,5 нм растут при температурах 1100°C – 4,9 нм, 1200°C – 5,2 нм и 1500°C – 5,3 нм. Рефлексы, полученные при снятии рентгенограммы, (111), (220) и (311) имеют аномальное уширение, что свидетельствует о малых размерах зон когерентного рассеяния. В

алмазе зона когерентного рассеяния совпадает с размером атомов кристалла.

Библиографический список:

1. Г.В. Сакович, В.Ф. Комаров, Е.А. Петров Синтез, свойства, применение и производство наноразмерных синтетических алмазов. Часть 1. Синтез и свойства // Сверхтвердые материалы – 2002. – №. 3. – С. 3-18

2. Байтингер Е.М., Беленков Е.А., Бржезинская М.М., Грешняков В.А. Особенности строения детонационных наноалмазов по результатам электронно-микроскопических исследований // Физика твердого тела, 2012, том 54, вып. 8.

3. Плотников В.А., Демьянов Б.Ф., Макаров С.В., Богданов Д.Г. Примесная подсистема детонационного наноалмаза // Фундаментальные проблемы современного материаловедения, 2013, том 10, №4, стр. 487-492.

4. Долматов В.Ю. Детонационные наноалмазы: синтез, строение, свойства и применение // Успехи химии 76 (4) 2007.

5. Плотников В.А., Богданов Д.Г., Макаров С.В. Детонационный наноалмаз: моногр. Изд-во АлтГУ, Барнаул, 2014, 224с.

6. Чепуров А.И., Федоров И.И., Сонин В.М. Экспериментальное моделирование процессов алмазообразования, РАН, Сиб. отделение, Объед. институт геологии геофизики и минералогии, КТИ монокристаллов. Новосибирск: Изд-во СО РАН, НИЦ ОИГТМ, 1997. 196 с.

7. Гинье А. Рентгенография кристаллов. Теория и практика. — М., 1961.

8. Бокай Г.Б., Порай-Кошиц М.А. Рентгеноструктурный анализ, М.: Издательство московского университета 1964. - 492 с.

9. Плотников В.А., Богданов Д.Г., Макаров С.В. Детонационный наноалмаз: монография. Изд-во АлтГУ, Барнаул, 2014, 224с.

ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ ТЕРМОБАРИЧЕСКИ СПЕЧЕННЫХ АЛМАЗНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Богданов А.С.¹, Богданов Д.Г.¹, Московкина А.К.¹, Шевчук Е.П.²

¹*Алтайский государственный университет, Барнаул, Россия*

²*ВКГУ им. С. Аманжолова, г. Усть-Каменогорск, Казахстан*

E-mail: alexsandr-bogdanov@mail.ru

Научный руководитель Плотноков В.А.

Введение

Углерод может находиться в различных формах, таких как алмаз, наноалмаз, графит, нанографит, карбин, фуллерены, нанотрубки, алмазоподобные структуры, стеклоуглерод, сажа и др. Научный и практический интерес представляет исследование фазовых переходов в углеродных материалах. Это связано, во-первых, с возможностью варьирования структуры (от sp до sp^3) и размера (от нескольких нанометров) исходного углеродного материала и, во-вторых, с возможностью получения углеродных материалов, обладающих уникальными свойствами, такими как твердость, теплопроводность, электропроводность и др. Развитая поверхность наноуглеродных материалов с большим количеством оборванных химических связей может быть химически модифицирована, а возникающие внутренние напряжения в таких структурах влияют на условия термодинамического равновесия между углеродными материалами с различной гибридизацией.

Благодаря эффективной передаче ковалентными связями колебаний атомов алмаз обладает высочайшей теплопроводностью до 2400 Вт/(м·К), уступая только графену [1]. Это связано с его рекордно высокой температурой Дебая $T_D = 1860$ К, благодаря чему комнатная температура является «низкой» в отношении динамики решетки алмаза. В результате алмаз может служить «идеальной» теплоотводящей диэлектрической подложкой. Более того, в очищенном от изотопов алмазе (природные кристаллы содержат 1,1 % изотопа ^{13}C) теплопроводность может достигать 3300 Вт/м·К [2]. Напомним, что при комнатной температуре теплопроводность меди равна 380 Вт/(м·К), а теплопроводность широко используемых керамик как SiC или AlN не превышает 300 Вт/(м·К). Высокая теплопроводность алмаза позволяет рассматривать его как материал для создания высокоэффективных теплоотводов для полупроводниковой промышленности и электроники.

Наноалмаз является наиболее устойчивым соединением углерода при размерах частиц до 5 нм. Интерес ученых к наноалмазу вырос после того, как его впервые обнаружили в метеоритах. Несколько форм наноразмерного алмаза были обнаружены в межзвездной пыли, продуктах детонационного синтеза и алмазоподобных пленках. Самым распространенным методом получения наноалмазов является метод детонационного синтеза, такие наноалмазы называются детонационными или, чаще, ультрадисперсными (УДА). УДА получают путем химических превращений на фронте детонационной волны при взрыве мощных взрывчатых веществ, при этом в условиях высоких температуры и давлений формируется алмазная фаза углерода [3]. В детонационном синтезе наноалмазов присутствуют три основные стадии – образование свободного углерода в результате детонационного превращения взрывчатого вещества; быстрое расширение продуктов детонации и их охлаждение с образованием алмазных наночастиц.

Детонационный наноалмаз имеет малую дисперсию размера алмазного ядра ~4-5 нм и развитую химически активную поверхность, толщину которой можно менять. Одним из способов изменения свойств ядра и/или поверхности детонационного наноалмаза является воздействие на детонационный алмаз высокого давления и высокой температуры. При этом можно ожидать как появления дислокаций в алмазном ядре и уменьшения размеров ядра в результате разрушения, так и увеличения размера алмазного ядра в результате спекания [4, 5].

Традиционное прессование и спекание детонационных наноалмазов, как в условиях динамического, так и статического нагружения сопровождается рядом трудностей. В качестве основных причин невысокого качества компактов можно назвать следующие: кластерная структура и, как утверждается в некоторых работах, склонность порошка детонационного наноалмаза к графитизации при невысоких параметрах спекания [6].

Исследование процессов теплопередачи в наноразмерных объектах представляет особый интерес. Основными носителями тепла в неметаллах являются фононы. Фононы обладают двумя характерными длинами: длиной волны (1-3 нм) и длиной свободного пробега (10-100 нм). Используя наноразмерные структуры, такие как сверхрешетки, нанопроволоки или наночастицы, с размерами, сравнимыми с характерными длинами фононов, можно управлять теплопереносом в твердом теле.

В кристаллах с решетками типа алмаза в примитивной элементарной ячейке находятся два атома, имеется шесть фононных ветвей – три ветви акустических фононов (три кривые с более низкими энергиями) и три ветви оптических фононов [7]. Вдоль направлений высокой симметрии (таких как направления [100] и [111]) фононы можно классифицировать как поперечные и продольные в зависимости от того перпендикулярны или параллельны их смещения к направлению волнового вектора. В центре зоны Бриллюэна алмаза возможно одно трижды вырожденное колебание, включающее оба поперечных и продольный оптические фононы.

Материалы и методы исследования

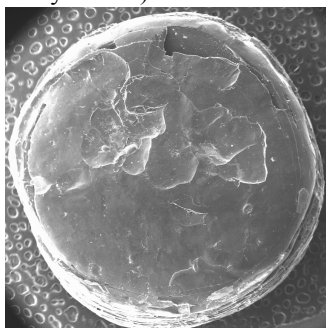
В данной работе для исследования использовался порошок детонационного наноалмаза, изготовленный ФНПЦ «Алтай» по ТУ 84-112-87. Термобарическое спекание наноалмазов осуществлялось на беспрессовом аппарате «Разрезная сфера» (БАРС) [8] в Институте геологии и минералогии СО РАН. Спекание проводилось при давлении 5 ГПа и температурах 1100, 1200, 1300 и 1500 °С. Время термобарического воздействия при достижении максимальных параметров спекания (при температурах 1100, 1200 и 1300 °С) составляло 60 секунд, при 1500 °С время спекания было увеличено до 15 минут. В процессе термобарического воздействия порошок находился в полуспеченной оксидной втулке из MgO. После спекания образцы извлекали механическим способом, а затем спеченные компакты УДА помещали в концентрированную азотную кислоту до полного растворения остатков втулки. Диаметр образцов составляет ~ 5 мм и толщиной ~ 3 мм.

Для измерения теплопроводности использовался прибор ИТ-λ-400. Для измерения теплопроводности в измерителе использован метод динамического калориметра. Измеритель предназначен для массовых исследований теплофизических свойств, поэтому в его основу положен режим монотонного нагрева, позволяющий из одного эксперимента получить сразу температурную зависимость изучаемого параметра и обеспечивающий высокую производительность. Блок питания и регулирования обеспечивает нагрев ядра измерительной ячейки со средней скоростью около 0,1 К/с и автоматическое регулирование температуры. Скорость разогрева определяется величиной начального напряжения на нагревателе и скоростью его изменения. Обе эти величины строго фиксированы. Источником регулируемого напряжения служит лабораторный автотрансформатор с электродвигателем и редуктором. Для определения теплопроводности

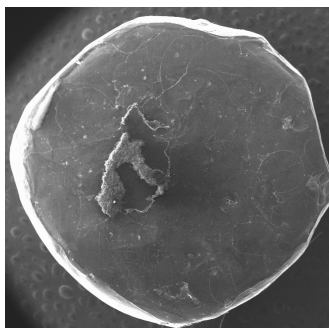
в эксперименте в процессе непрерывного разогрева на фиксированных уровнях температуры с помощью прибора Ф136 (в микровольтах) измеряется перепад температур на образце и пластине тепломера. Измерение теплопроводности образцов проводилось в интервале температур 50-250 °С, охлаждение измерительной ячейки в области отрицательных температур не производилось.

Результаты и обсуждение

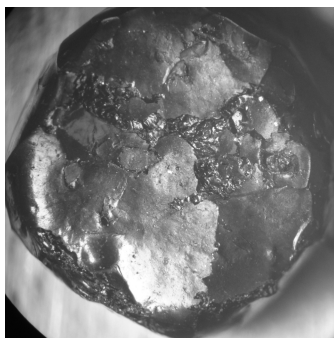
На рисунке 1 представлены фотографии спеченных образцов детонационного наноалмаза при давлении 5 ГПа и температурах 1100, 1200, 1300 и 1500 °С соответственно. Структура после очищения от керамической втулки представляет собой дефектную структуру в виде микротрещин и геометрической неровности (каверны, впадины и выпуклости).



1100 °С



1200 °С



1300 °С



1500 °С

Рис.1. Макросъемка спеченных образцов детонационного наноалмаза при давлении 5 ГПа и различных температурах (1100, 1200, 1300 и 1500 °С)

Согласно экспериментальным данным (таблица 1 и рисунок 2), теплопроводность образцов, полученных при таких термобарических параметрах спекания, очень низка. Видно, что значение теплопроводности образцов в температурном интервале измерений практически остается постоянной, увеличение теплопроводности при повышении температуры спекания наноалмазов не наблюдается. Так, среднее значение теплопроводности образцов, спеченных при температуре $T=1100\text{ }^{\circ}\text{C}$ составляет $\sim 16\text{ Вт/(м}\cdot\text{K)}$, при $T=1200\text{ }^{\circ}\text{C} \sim 18\text{ Вт/(м}\cdot\text{K)}$, при $T=1300\text{ }^{\circ}\text{C} \sim 14\text{ Вт/(м}\cdot\text{K)}$, при $T=1500\text{ }^{\circ}\text{C} \sim 16\text{ Вт/(м}\cdot\text{K)}$.

Таблица 1.
Зависимость теплопроводности спеченных наноалмазных образцов от температуры

Температура измерений, $^{\circ}\text{C}$	Теплопроводность наноалмазных образцов спеченных при различных температурах, λ , (Вт/(м·K))			
	1100 $^{\circ}\text{C}$	1200 $^{\circ}\text{C}$	1300 $^{\circ}\text{C}$	1500 $^{\circ}\text{C}$
50	17,00	18,69	8,84	14,28
75	16,46	17,22	11,74	14,10
100	15,35	14,10	13,85	13,88
125	17,84	18,14	17,36	18,08
150	18,11	22,33	20,82	20,42
175	17,95	23,51	19,96	20,43
200	13,76	16,77	12,13	14,11
225	12,32	12,53	10,38	11,44
250	15,45	15,43	13,16	13,52
среднее значение	16,03	17,64	14,25	15,58

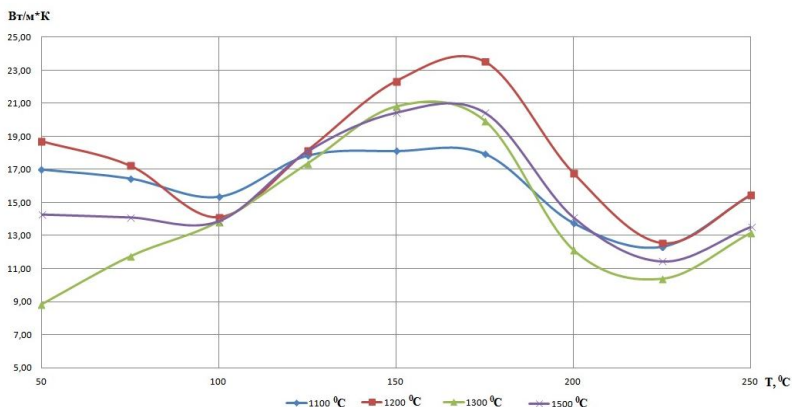


Рис. 2. График зависимости теплопроводности спеченных наноалмазных образцов от температуры

При подходе к теории о фоновой теплопроводности, из общих соображений следует, что наличие большого количества атомов на поверхностях раздела должно оказывать значительное влияние на фоновый спектр и связанные с ним термические свойства (теплоемкость, тепловое расширение, температура плавления, решеточная составляющая теплопроводности и др.).

Согласно опытным данным, функции распределения, колебательных частот обычных материалов и нанообъектов заметно отличаются. В фоновом спектре наноматериалов появляются дополнительные, как низкочастотные, так и высокочастотные моды. Изменение динамики кристаллической решетки при переходе от макроскопических монокристаллов к нанокристаллам таково, что происходит увеличение амплитуды колебаний атомов, а фоновый спектр в целом сглаживается.

Основной вклад в теплопроводность диэлектриков при низких температурах вносят акустические фононы, так как в этом случае они имеют большую подвижность. В общем случае теплопроводность носит анизотропный характер, и соответственно коэффициент теплопроводности является тензором, но в первом приближении мы предполагаем, что теплопроводность носит изотропный характер. Сопротивление тепловому потоку в диэлектрических кристаллах возникает в результате неупругого рассеяния фононов на различных дефектах: границах кристалла, точечных дефектах и протяженных дефектах.

Природа немотонного изменения теплопроводности в интервале температур 100-200 °С не всегда поддается объяснению и нуждается в дальнейшем изучении. Под влиянием размеров кристаллитов претерпевают изменения и такие параметры фононного спектра, как характеристическая температура и фактор Дебая—Уоллера, отражающий атомные смещения.

Очевидно, что роль фононной теплопроводности может быть прослежена достаточно четко только в том случае, когда величину, связанную с параметрами, характеризующими энергетическое состояние электронов проводимости, можно считать постоянной.

Одно из возможных объяснений заключается в том, что в связи с имеющимися визуально наблюдаемыми дефектами, существуют некоторые протяженные дефекты по объему, ограничивающие длину свободного пробега фононов, влияние которых не учтено. Однако при этом влияние этих дефектов не должно исчезать при понижении или повышении температуры.

Заключение

Основной вклад в уменьшении теплопроводности вносят не режимы термобарического спекания, а дополнительные всевозможные дефекты в виде микротрещин, пор, дислокаций образованных в процессе формирования спеченных компактов.

Для более глубокого понимания имеет смысл провести исследования спекания алмазов при более высоких термобарических параметрах и также с добавлением металлов-катализаторов, которые возможно будут выступать в качестве связующего компонента. Анализ этих исследований с использованием данных о структуре детонационных наноалмазов может помочь более конкретно определить процессы рассеяния фононов и их влияние на теплопроводность.

Список использованных источников

1. A. A. Balandin, S. Ghosh, D. Teweldebrhan, I. Calizo, W. Bao, F. Miao, C. N. Lau. Extremely high thermal conductivity of graphene: experimental study // Nano Lett. 8, 3 (2008) 902-907.
2. T. R. Anthony, W. F. Banholzer, J. F. Fleischer, L. Wei, P. K. Kuo, R. L. Thomas, and R. W. Pryor, Thermal diffusivity of isotopically enriched C12 diamond // Phys. Rev. B 42, 2 (1990) 1104-1111.
3. В. Ю. Долматов. Ультрадисперсные алмазы детонационного синтеза: свойства и применение // Успехи химии 70 (2001) 687–708.

4. Plotnikov V.A., Makarov S.V., Bogdanov D.G., Bogdanov A.S. The structure of detonation nanodiamond particles // AIP Conf. Proc. 1785, 040045-1–040045-4.

5. Плотников В.А., Демьянов Б.Ф., Макаров С.В., Черков А.Г.. Атомная структура нанокристаллов детонационного алмаза // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2012. № 4. С. 521-526.

6. Наноалмазы детонационного синтеза: получение и применение / П.А. Витязь [и др.] ; под общ. ред. П.А. Витязя. – Минск : Беларус. навука, 2013. С. 381.

7. P. Yu. M. Cardona. Fundamentals of Semiconductors. Перевод под ред. Б. П. Захарчи // Berlin: Springer, 2010.

8. Экспериментальное моделирование процессов алмазообразования / Чепуров А.И., Федоров И.И., Сонин В.М., РАН, Сиб. отд-ние, Объед. ин-т геологии геофизики и минералогии, КТИ монокристаллов. Новосибирск: Изд-во СО РАН, НИЦ ОИГТМ, 1997. 196 с.

АКУСТИЧЕСКАЯ ЭМИССИЯ В УСЛОВИЯХ НАКОПЛЕНИЯ И ВОЗВРАТА ДЕФОРМАЦИИ В НИКЕЛИДЕ ТИТАНА

Злобина Е.С.

Алтайский государственный университет, Барнаул, Россия

E-mail: ekaterinazlobina.hp@gmail.com

Научный руководитель Плотников В.А.

Введение

Явление акустической эмиссии заключается в испускании сплавом упругих волн в результате локальной перестройки структуры, при термоупругих мартенситных превращениях, то есть акустическая эмиссия позволяет получать информацию о процессах, протекающих в сплаве. Например, акустическая эмиссия при термоупругих мартенситных превращениях позволяет оценить кинетику этих фазовых переходов и контролировать процесс формирования мартенситной структуры.

Можно выделить два фактора, влияющих на термоупругие мартенситные превращения в сплаве никелид титана. Один из них это структура сплава, определяющая физико-механическими свойствами и морфологию мартенситных кристаллов. Ко второму фактору можно отнести внешнее механическое напряжение и температуру. При охлаждении никелида титана в условиях внешней нагрузки происходит

накопление обратимой мартенситной деформации и необратимой пластической деформации как результат фазового наклепа. Акустическая эмиссия, сопровождающая мартенситные превращения, фиксирует как накопление обратимой деформации, так и фазовый наклеп и влияние на эти процессы внешней нагрузки.

Исследование акустической эмиссии при термоупругих мартенситных превращениях в никелиде титана позволяет получать информацию о механизмах накопления и возврата деформации, а также и о самой природе акустического излучения.

Сплавы и методика эксперимента.

Для проведения эксперимента был выбран сплав никелида титана марки ТН-1В, выплавленный в НИИ медицинских материалов и имплантатов с памятью формы Сибирского физико-технического института при Томском государственном университете. Условия выплавки сплава и его термомеханическое поведение описаны в источниках [2, 3]. В таблице 1 приведены некоторые характеристики сплава марки ТН-1В.

Таблица 1.
Характеристики сплава ТН-1В

Сплав	Предел текучести, МПа	Напряжение мартенситного сдвига, МПа	Температурный интервал $B2 \rightarrow B19'$ превращения, °C	Температурный интервал $B19' \rightarrow B2$ превращения, °C
ТН-1В	280	180	85 – 35	77 – 120

Перед экспериментами образец отжигали при температуре 600°C. После отжига никелид титана охлаждался до комнатной температуры. При достижении температуры 200 °C образец подвергался механическому нагружению. Началом первого цикла эксперимента является охлаждение от 200°C до комнатной температуры, в ходе охлаждения в нагруженном состоянии осуществлялось прямое мартенситное $B2 \rightarrow B19'$ превращение, сопровождающееся продуцированием сигналов акустической эмиссии [4]. В каждом цикле регистрировались акустическая эмиссия, температура и деформации. С помощью аналого-цифровых преобразователей данные преобразовывались в цифровой код и вводились в компьютер. Сохранение данных и их обработка

осуществлялась при помощи программного обеспечения «Регистратор данных АЦП»[5].

Результаты экспериментов

Как показано на рис. 1 в ходе охлаждения при достижении температуры 115 °С регистрируется среднеквадратичное напряжение акустической эмиссии, превышающей уровень фона, величина которого составляет примерно 0,3 мкВ. При 75 °С наблюдается максимум среднеквадратичного напряжения, а при 60 °С акустическая эмиссия выходит на уровень фона. Одновременно в одном и том же временном масштабе регистрировали накопление деформации. Однако накопление деформации сдвинуто примерно на 20 °С по сравнению с температурой начала акустической эмиссии. То есть накопление деформации в цикле начинается в ходе охлаждения примерно при температуре 96 °С и достигает максимального значения при 55 °С. Максимум акустической эмиссии соответствует накоплению примерно значения 0,3 от величины максимума деформации, величина которой в цикле достигает 1,05 %. При нагреве до 128 °С начинается возврат деформации, окончание которого наблюдается при 221 °С. То есть возврат деформации осуществляется в ходе обратного мартенситного превращения B19'→B2. Следует отметить, что при нагреве при завершении температурного цикла мы видим недовозврат деформации, связанного с кристаллической перестройкой и накоплением дислокаций в сплаве. Значение остаточной деформации в цикле охлаждение-нагрев составляет 0,08%.

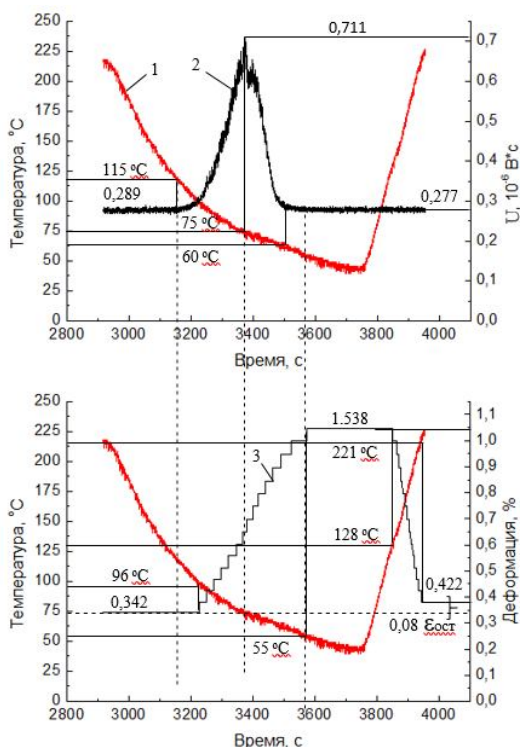


Рис. 1. График зависимости среднеквадратичного напряжения акустической эмиссии и деформации от времени в цикле охлаждения и последующего нагрева (т.е. в ходе перехода фазы В2 в фазу В19' и из фазы В19' в фазу В2) образца при нагрузке 56 МПа. Цифрами 1, 2 и 3 обозначены температура, акустическая эмиссия и деформация соответственно.

В ходе первой серии эксперимента было проведено 17 циклов охлаждения и нагрева (т.е. в ходе перехода фазы В2 в фазу В19' и из фазы В19' в фазу В2) при нагрузке 56 МПа. Отметим, что в ходе многократного циклирования мартенситных превращений энергия акустической эмиссии снижается и выходит на насыщение. Проанализируем энергетический параметр J акустической эмиссии от номера цикла (рис. 2), где параметр J вычисляется по формуле:

$$J = \sum_{i=A}^B U_i^2 \cdot \Delta t, [J] = B^2 \cdot c \quad (1)$$

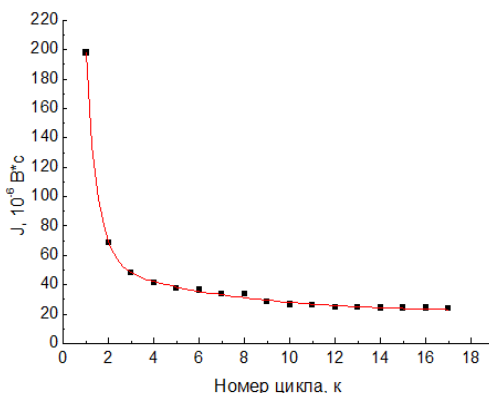


Рис. 2. График зависимости энергетического параметра акустической эмиссии J от номера цикла k в первой серии эксперимента при нагрузке 56 МПа.

Как следует из данных рис. 2 зависимость снижения энергетического параметра J можно аппроксимировать экспоненциальным уравнением:

$$J_k = J_{\text{нас}} + J_0 * \exp(-a * k) \quad (2)$$

где: J_k -параметр акустической эмиссии k -го цикла, $J_{\text{нас}}$ - параметр акустической эмиссии области насыщения, J_0 - начальный параметр акустической эмиссии, k - номер цикла, a – коэффициент фазового наклёпа.

Определение и анализ параметров аппроксимации осуществили путем логарифмирования уравнения (2) и дифференцирования по k :

$$\ln(J_k - J_{\text{нас}}) = \ln J_0 - a * k \quad (3)$$

$$\frac{d(\ln(J_k - J_{\text{нас}}))}{dk} = -a \quad (4)$$

В табл. 2 приведены параметры уравнения (2) для серий циклов при нагрузках от 56 до 170 МПа. При увеличении нагрузки коэффициент a (коэффициент фазового наклёпа), характеризующий скорость снижения энергии акустической эмиссии в серии, увеличивается от 1,034 до 1,11 7. Характер зависимости величины коэффициента a представлен на рис. 3.

Таблица 2.
Параметры аппроксимации зависимости энергетического параметра J от номера цикла термоупругих мартенситных превращений

Номер серии циклов	Нагрузка в серии циклов, МПа	$J_{\text{нас.}}, 10^{-2} \cdot \text{В}^2 \cdot \text{с}$	$J_0, 10^{-2} \cdot \text{В}^2 \cdot \text{с}$	a	R^2
1	56	$1156,3 \pm 126,967$	$43,657 \pm 3,961$	$1,034 \pm 0,021$	0,977
2	113	$60,953 \pm 6,322$	$639,566 \pm 34,296$	$1,042 \pm 0,031$	0,997
3	141	$45,835 \pm 6,377$	$670,129 \pm 13,079$	$1,072 \pm 0,028$	0,875
4	170	$35,311 \pm 3,897$	$761,224 \pm 30,054$	$1,177 \pm 0,046$	0,987

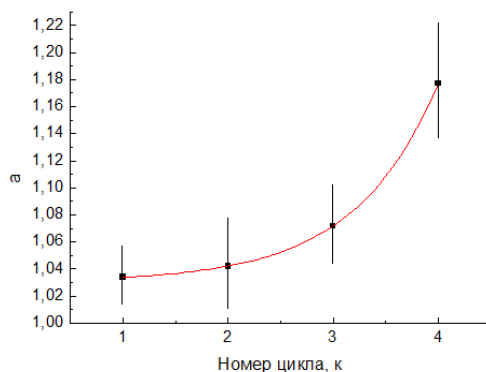


Рис. 3. Зависимость коэффициента a от номера серии многократных циклов.

Такое поведение параметра a , очевидно, связано не только с обратимыми термоупругими мартенситными превращениями в никелиде титана, но и с процессами накопления и возврата деформации. Рассмотрим деформационные составляющие в ходе циклирования мартенситных превращений (рис.4).

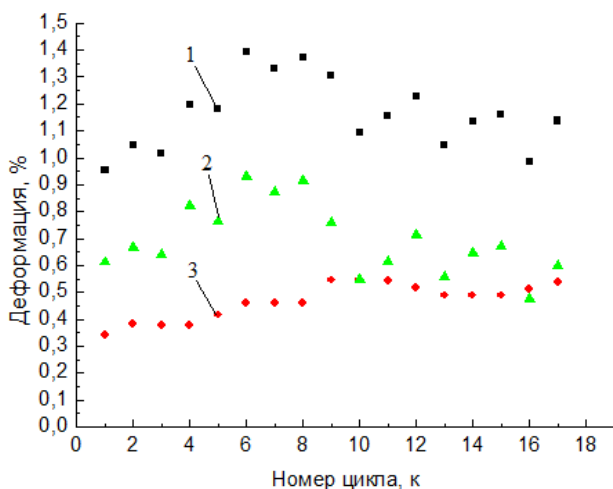


Рис. 4. График зависимости накопления (1), возврата (2) и недовозврата (3) деформации от номера цикла k . Нагрузка в цикле 56 МПа.

Как следует из данных рис. 4 при проведении серии циклов мартенситных превращений при постоянном приложенном механическом напряжении наблюдается накопление как обратимой (2), так и остаточной (3) деформаций. Характерно, что наблюдается прирост остаточной деформации в серии циклов. Как показано на рис. 5 прирост остаточной деформации максимален в первых циклах термоупругих превращений, затем при многократном циклировании как и акустическая эмиссия выходит на насыщение. Таким образом, снижение энергетического параметра J в серии циклов коррелирует с приростом остаточной деформации.

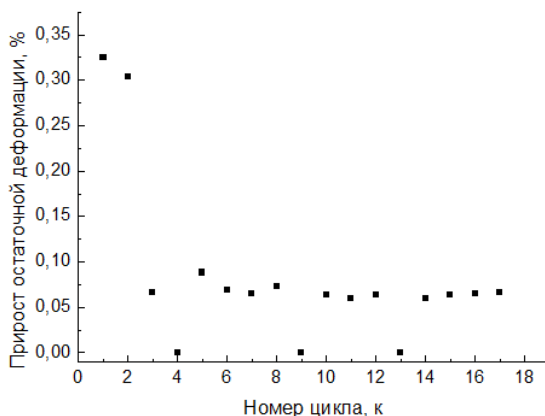


Рис. 5. График зависимости остаточной деформации в циклах эксперимента с нагрузкой 56 МПа.

Заключение

Термоупругие мартенситные превращения в никелиде титана в цикле нагрев – охлаждение сопровождаются акустической эмиссией. В ходе многократных циклов термоупругих мартенситных превращений наблюдается снижение энергии акустической эмиссии J до уровня насыщения. Коэффициент a в экспоненциальной зависимости характеризует скорость снижения акустической эмиссии в цикле.

Деформация циклах нагрев - охлаждения в сплаве состоит из трех составляющих: полной деформации, накапливаемой при охлаждении, обратимой, которая обратима при нагреве в цикле и остаточной деформации, накапливаемой в каждом цикле термоупругих мартенситных превращений.

Список используемой литературы

1. Плотников В.А. «Физика металлов глазами профессора В.А. Плотникова». [Текст] / В.А. Плотников – Издательство АлтГУ: Газета «За науку» №4 (1343) за 6 февраля 2014 г. 6 с.
2. Физико-механические и прочностные свойства сплавов на основе никелида титана (ТН-10, ТН-20, ТН-1В) //Известия Томского политехнического университета [Известия ТПУ] / Томский политехнический университет (ТПУ). – 2013. - Т. 322, № 2 – с. 135-139.
3. Медицинские материалы и имплантаты с памятью формы. Медицинские материалы с памятью формы. Т. 1 / В.Э. Гюнтер, В.Н.

Ходоренко, Т.Л. Чекалкин, и др. / Под ред. В.Э. Гюнтера. – Томск: Изд-во МИЦ, 2011. – 534 с.

4. Деформационные особенности эффекта памяти формы сплавов на основе никелида титана / Новые материалы и технологии: сборник научных статей IV Российско-Казахстанской молодежной научно-технической конференции / Злобина Е.С., Грязнов А.С., Плотников В.А. / 2015 г. Барнаул, АЗБУКА, 2015. – 256 с.

5. Регистратор данных АЦП (dotScope): свид. гос. рег. прогп. ЭВМ №2008612034 / В. А. Плотников, А. С. Грязнов ; заявитель и правообладатель Алтайский государственный университет. — № 2008610809 ; заявл. 28.02.08 опубл. 23.04.2008.

EFFECT OF TEMPERATURE ON THE THRESHOLD DISPLACEMENT ENERGY IN NICKEL

Trung N.T.H¹, Phuong H.S.M^{1, 2}, Starostenkov M.D¹

¹*Altai State Technical University, Barnaul, Russia*

²*Nuclear Research Institute, Da Lat, Vietnam*

Abstract

In this work, the impact of temperature on TDE of face-centered cubic nickel in some main crystallographic directions $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$, $\langle 135 \rangle$ has been calculated by molecular dynamics method at different temperature from 10 K to 1000 K. We observed the TDE appears to increase with increasing temperature as a result of thermal recombination. For example, it is show that with temperature increased from 300 K to 600 K, the effective threshold displacement energy in all direction can increase up to approximately 8 eV. We have proposed that in each material exists a transition point, from which the TDE starting to decrease with increasing of temperature. The results are discussed.

Keywords: molecular dynamics, threshold displacement energy, Frenkel pair, temperature dependence, thermal annealing, transition point, binary search algorithm

1. Introduction

Threshold displacement energy (TDE) is an important factor to determinate the defect production, particularly the number of Frenkel pair in NRT and KP displacement model of primary radiation damage in material. In crystal solid, TDE magnitude is a function of crystallographic direction, temperature, applied strain and many other factors [1]. The threshold displacement energies have been studied extensively with electron irradiation experiments. The first experiment to determine the TDE value of

nickel Ni was conducted by H.M Kenworthy and H.H Neely in 1956. Nickel foils, 10000 Å were irradiated at 4.2 K with a variable energy electron beam. The TDE in nickel was determined by measuring the minimum energy of electrons required to produce an increase in electrical resistivity. The electron threshold was found to be 0.59 MeV, this corresponds to a TDE in nickel of 34.5 eV at 4.2 K [2]. Until recently many experiments have conducted to calculate the TDE of nickel at different temperature. However the results are significant different between these experiments since calculation of the TDE is not trivial problem because of the stochastic nature of primary damage events [3]. The displacement cascade under irradiation is a complex multi-body collision process that requires a large numbers of primary knock-on atom collisions to be evaluated to achieve accurate statistics of these experiments. Computer simulation method can be applied to overcome this shortcoming. For this reason in this paper we performed several classical molecular dynamics (MD) simulations to investigate the impact of temperature on the threshold displacement energies in nickel along some basic crystallographic directions.

II. Method

The molecular dynamics method was applied to investigate the effect of temperature on the TDE of nickel by using the modified Mishin potential [4]. This potential was modified following the procedure in the work of Stoller et al. that involves the use of ab initio calculations to determine the magnitude and spatial dependence of the pair interactions at intermediate distances [5]. The procedures to modify Mishin potential for cascade simulation are beyond the scope of this paper, but they can be found in our other work [6]. The modified potential correctly reproduced not only the equilibrium lattice parameters, cohesive energies, lattice constants and others equilibrium properties but also the threshold displacement energies of the pure Ni, Al and their alloys B2 NiAl [6].

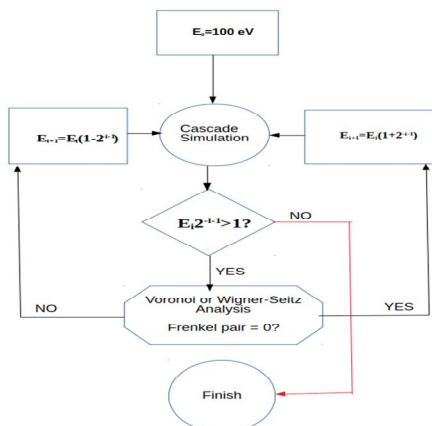


Fig.1 Block diagram of the simulation algorithm to evaluate the threshold displacement energy

The LAMMPS with GPU and Voronoi package [7, 8, 9] was used to simulate the displacement cascades in simulation box contains 30x30x30 unit cells with 108,000 atoms. Periodic boundary conditions are applied in three directions. In all cascades, the primary knock-on atom (PKA) was given first kinetic energy of 100 eV in some basic crystallographic directions. The first 10 ps were used to equilibrate the system to target temperature with 0 bar of pressure by NPT ensemble. After the PKA is given the kinetic energy of 100 eV, the MD was run at a constant NVE. A variable time-step was used for at least 0.2 ps to limit the distance traveled by atoms between timesteps to ensure numerical accuracy and simulation efficiency. After 0.2 ps with variable time-step for primary collision, simulation time-step resets to 0.001 ps and system is equilibrated for 10 ps. This process continues by binary search algorithm as can be seen on Figure 1 until at least one stable Frenkel pair (FP) remains after simulation. To determinate the number of FP we used Voronoi and Weigner-Seitz analysis in Ovito [10, 11]

III. Results and discussion

Before quantitatively evaluate the effect of temperature on threshold displacement energy, it is helpful to discuss the nature of the displacement cascade, which lead to the formation of Frenkel pairs. The time evolution of Frenkel pair in a displacement cascade can be divided into four stages as

described in the work of Beland et al: supersonic, intermediate transonic, sonic and the so-called thermal annealing [12].

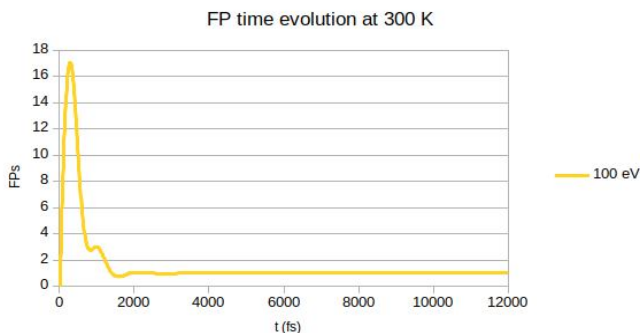


Fig.2 Frenkel pair time evolution in a displacement cascade with $E_{PKA} = 100$ eV

Figure 2 shows a typical FP time evolution in a displacement cascade in our simulation with $E_{PKA}=100$ eV at 300 K. The supersonic phase lasted 0.1 ps followed by intermediate transonic and sonic phase that lead to the FP peak at 0.4 ps corresponds to 100 eV of PKA energy. With such low PKA energy, the thermal spike is not formed like the simulations with PKA energy > 1 keV from our other work. Each simulation lasted up to 20 ps, at which point at least one FP become stable after the thermal annealing phase.

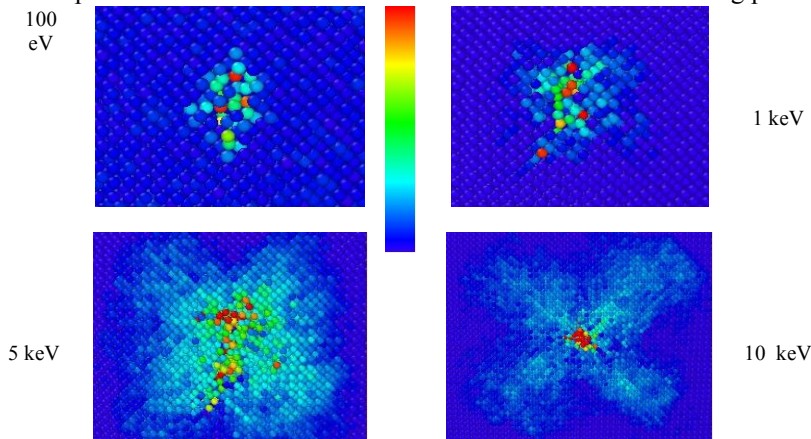


Fig.3 Displacement magnitude at the peak of Frenkel pairs of 100 eV PKA in compare with other higher PKA energy.

Figure 3 demonstrate the displacement magnitude of a displacement cascade with PKA energy of 100 eV. As can be seen the displacement almost can not distinguish due to small magnitude. Therefore the interstitial atom in survived FP must locates nearby its primitive cell. In crystal solid, threshold displacement energy is a function of crystallographic direction. Because of that for each direction, total 10 simulations were performed to obtain a confident estimate of the average TDE. The average results of the TDE in each direction are presented in table 1.

Table 1.
Average result the TDE in nickel (± 2 eV) from 10 simulations in each direction with corresponding temperature

Temperature (K)	Crystallographic direction [hkl]			
	[100]	[110]	[111]	[135]
10	38	21	69	165
100	41	28	87	178
300	46	32	95	181
600	59	35	102	190
1000	66	43	115	192

Like many report from literature previously, we observed the TDE of nickel appears to increase with increasing temperature as a result of thermal recombination [1, 5, 13]. The thermal activation of Frenken pair at higher temperature can be significantly decreased the defect formation probability and causes an increase in the value of the TDE. For example, it is show that with temperature increased from 300 K to 600 K, the effective threshold displacement energy in four directions can increase up to approximately 8 eV. There is no experiment data available for threshold displacement energy of nickel at temperature higher than 600 K [5, 14]. The behavior of TDE at higher range of temperature near the melting point is expected to be different since the increasing of TDE by temperature can not last forever. The results from our simulation are in good agreement with reports from literature at temperature range between 10 K – 300 K along $\langle 100 \rangle$ and $\langle 110 \rangle$ directions [5]. We however cannot obtain a reasonable value of effective threshold displacement energy because do not have larger enough simulation in all directions.

IV. Conclusion

We performed comprehensive molecular dynamics simulation by using binary algorithm to investigate the effect of temperature on TDE of

nickel. The results from simulation suggested that the TDE seem to increase with temperature range between 10 K -1000 K as a result of thermal recombination. However in higher range of temperature this dependence can be different. Each material must exist a transition point from which the TDE starting to decrease with the increasing of temperature and this point is expected to be lower than melting point of this material. Finding this transition point is helpful for the research of radiation resistant materials for application in new generation of nuclear reactor since materials to be used for Generation IV reactors and future fusion reactors will operate at even higher temperatures 500° C–1000° C and experience damage up of ~30–100 dpa [15].

References

- [1] Was G S 2007 Fundamentals of Radiation Materials Science: Metals and Alloys (Berlin: Springer).
- [2] Kenworthy H M and Neely H H 1956 Threshold displacement energy in nickel Canoga Park, California : Atomics International
- [3] 1991 Landolt-Börnstein - Group III Condensed Matter, Atomic Defects in Metals, vol 25, ed H. Ullmaier (Springer-Verlag Berlin Heidelberg)
- [4] Purja Pun G P and Mishin Y 2009 Phil. Mag. 89 3245
- [5] Stoller R E, Tamm A, et al. J. 2016 Chem. Theory Comput. 12(6) 2871-9
- [6] N T H Trung et al 2018 IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 447 012004
- [7] Plimpton S 1995 J Comp Phys 117 1-19
- [8] Brown W M, Wang P, Plimpton S J, Tharrington A N 2013 Implementing Molecular Dynamics on Hybrid High Performance Computers - Short Range Forces Computer Physics Communications 184 2785-93 (Preprint)
- [9] Rycroft C. H. 2009 Chaos 19 041111
- [10] Stukowski A 2012 Modell. Simul. Mater. Sci. Eng. 20 045021
- [11] Stukowski A 2010 Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 18 015012
- [12] Béland L K, et al 2016 J. Appl. Phys. 119 085901
- [13] Konobeyev A Yu, Fischer U, Korovin Yu A, Simakov S P 2017 Nuclear Energy and Technology 3 169-175
- [14] Dimitrov C, Sitaud B, Dimitrov O 1994 Journal of Nuclear Materials 208 53-60
- [15] Development of Radiation Resistant Reactor Core Structural Materials, IAEA technical report, https://www.iaea.org/About/Policy/GC/GC51/GC51InfDocuments/English/gc51inf-3-att7_en.pdf.

ЯВЛЕНИЕ НЕЛИНЕЙНОЙ СУПРАТРАНСМИССИИ В КРИСТАЛЛЕ Pt_3Al ПРИ АКТИВНОМ ВНЕШНЕМ ВОЗДЕЙСТВИИ

Захаров П. В.¹, Ерёмин А. М.^{1,а}, Старостенков М. Д.²,
Чередниченко А. И.¹, Кудряшова О. Б.³, Вдовин Р. С.¹

¹*Алтайский государственный гуманитарно-педагогический университет им. В.М. Шукина, г. Бийск,*

²*Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, г. Барнаул,*

³*Институт проблем химико-энергетических технологий СО РАН, г. Бийск*

E-mail: ^аeam77@yandex.ru

Методом молекулярной динамики рассмотрено явление нелинейной супратрансмиссии в кристалле Pt_3Al , заключающийся в передаче энергии на частотах вне фононного спектра кристалла. Модель представляла собой объемный гранецентрированный кубический кристалл, атомы которого взаимодействовали посредством многочастичного потенциала, полученного методом погруженного атома. Рассмотрены разные формы осцилляции области внешнего воздействия. Показана возможность транспорта энергии от поверхности кристалла вглубь посредством возбуждения квазибризеров вблизи области воздействия и последующего их разрушения в кристалле и рассеяния запасенной на них энергии. Под квазибризерами понимаются высокоамплитудные нелинейные колебания атомов легкой компоненты сплава на частотах вне фононного спектра кристалла.

1. Введение

Способы модификации приповерхностных слоев материалов очень часто базируются на обработке поверхности высокоинтенсивными внешними воздействиями в виде плазменного разряда, отжига, импульсов тока и т.д. Потоки энергии от поверхности кристаллов оказывают влияние на структурные и энергетические трансформации материалов, обеспечивая таким образом модификацию приповерхностных слоев вещества.

В данной работе нами рассмотрено явление передачи энергии при периодическом воздействии на поверхность кристалла Pt_3Al , имеющего запрещенную зону в фононном спектре кристалла. Воздействие осуществлялось в широком диапазоне частот как, входящих в фононный спектр, так и вне фононного спектра кристалла.

Явление передачи энергии на частотах вне фононного спектра кристалла называют нелинейной супратрансмиссией [1]. Интерес к данному явлению не угасает как для относительно простых нелинейных систем [2], так и для более сложных систем и материалов [3-5]. В классическом подходе к супратрансмиссии имеется начальная величина амплитуды, при которой возникает данное явление. Однако в работе [3], на примере деформированного графена, показана возможность транспорта энергии посредством нелинейной супратрансмиссии без ограничений по минимальному значению амплитуды воздействия. Это мотивирует исследование данного явления для различных кристаллов и поиска механизмов передачи энергии в нелинейных системах.

Данный механизм трактуется возбуждением нелинейных локализованных мод большой амплитуды вблизи зоны воздействия – дискретных бризеров. Строго говоря, такие объекты следует называть квази-бризерами [6-12], в силу того, что они имеют конечное время жизни и не строгую периодичность по времени.

В работе рассматривается модель кристалла Pt_3Al . Интерес к данному сплаву вызван перспективой его применения в составе суперсплавов, а также его устойчивостью к высоким температурам. Кроме того, в работе [8] показана возможность возбуждения дискретных бризеров в данном материале потоком частиц и при термодинамическом равновесии [13].

2. Описание модели и методика компьютерного эксперимента

Рассматриваемая нами модель представляет собой объемный ГЦК кристалл стехиометрии A_3B , на примере Pt_3Al , который содержит $32 \cdot 10^3$ частиц (рис. 1), взаимодействующих посредством потенциала, полученного методом погруженного атома (EAM-потенциал) [14].

Моделирование осуществлялось посредством пакета LAMMPS [15]. На модель ГЦК кристалла вдоль осей X , Y накладывались периодические граничные условия, вдоль оси Z – свободные. Полученная модель была разделена на 3 блока. Блок I представлял собой 3-4 слоя атомов, которые осуществляли колебания по гармоническому закону в соответствии с диапазонами частот и амплитуд колебаний атомов. Периодическое воздействие применялось ко всем атомам из блока I. Далее находился блок II – поглотитель энергии, по которому происходило оценивание поглощенной энергии кристаллом. В части III расчетной ячейки выделялся блок из 4-5 слоев атомов, жестко зафиксированных, выполняющих роль демпфера. Это

обеспечивало отсутствие движения всей модели кристалла Pt_3Al , и делало модель более близкой к реальному кристаллу.

Были рассмотрены два варианта направления внешнего воздействия на кристалл. В первом случае кристалл ориентировался так, что ось Z соответствовала кристаллографическому направлению $\langle 110 \rangle$, во втором случае направлению $\langle 111 \rangle$.

При проведении расчетов шаг интегрирования составлял 1 фс при этом расчетное время каждого запуска составляло 1 пс, начальная температура расчетной ячейки задавалась 0 К. Для всех случаев рассматривался NVE-ансамбль.

На рис. 1, b приведена плотность фононных состояний рассматриваемой модели кристалла.

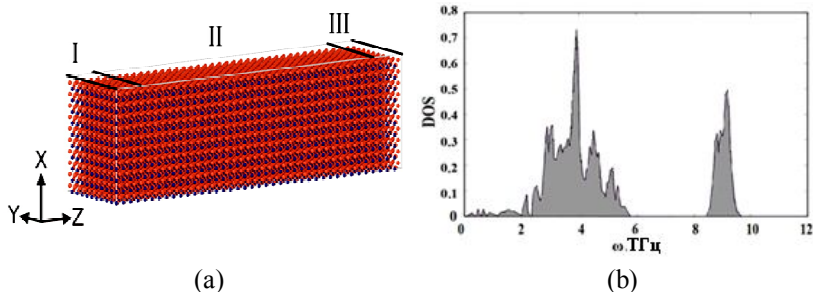


Рис. 1. а) Вид трехмерной модели кристалла Pt_3Al , ось X направлена вдоль кристаллографического направления $\langle -110 \rangle$, Y – $\langle 001 \rangle$, Z – $\langle 110 \rangle$. Цифрой I указана область периодического воздействия, II – область поглощения энергии, III – жестко зафиксированные атомы; б) плотность фононных состояний кристалла Pt_3Al .

Периодическое воздействие осуществлялось по следующим гармоническим законам:

$$Z_1(t) = A \sin(t) \quad (1)$$

$$Z_2(t) = A (\sin(\omega t))^2 \quad (2)$$

$$Z_3(t) = A |\sin(\omega t)| \quad (3)$$

где для всех случаев A амплитуда внешнего воздействия, ω частота колебаний области I на рис. 1, а. Колебания производились по оси Z с частотами от 0.2 до 15 ТГц, и с различными амплитудами от 0.05 до 0.5 Å, что обеспечивалось за счет запуска скрипта 52 раза для каждого значения амплитуды. Такой диапазон позволяет охватить весь спектр малоамплитудных колебаний атомов для рассматриваемого кристалла.

Поглощенная энергия для атомов зоны II рассчитывалась посредством вычисления кинетической энергии атомов этого блока, затем полученное значение делилось на количество атомов в данном блоке с последующим усреднением. Такие расчеты проводились для каждого значения частоты и для обоих направлений воздействий.

3. Основные результаты и обсуждения

Фиксировалась поглощенная энергия в зависимости от частоты воздействия и амплитуды. В качестве примера на рис. 2. (а) и (б) представлены результаты для воздействия по закону (1). Исходя из данного графика можно отметить, что для амплитуд менее 0.2 Å эффект передачи энергии кристаллу отсутствовал в запрещенной зоне фононного спектра (рис. 1,б). Для амплитуд 0.2 ангстрем и более происходит передача энергии кристаллу, в том числе на частотах в запрещенной зоне фононного спектра. С увеличением амплитуды пик поглощения смещается глубже в запрещенные частоты фононного спектра кристалла, что свидетельствует об увеличении доли нелинейных мод в процессе передачи энергии. Активное возбуждение бризеров происходит в непосредственной близости с областью воздействия, аналогичные результаты нами были получены ранее для двумерных моделей данного сплава [16]. Отметим, что имеется пороговое значение амплитуды воздействия, с которого начинает проявляться данное явление, что характерно при классической трактовке эффекта супратрансмиссии.

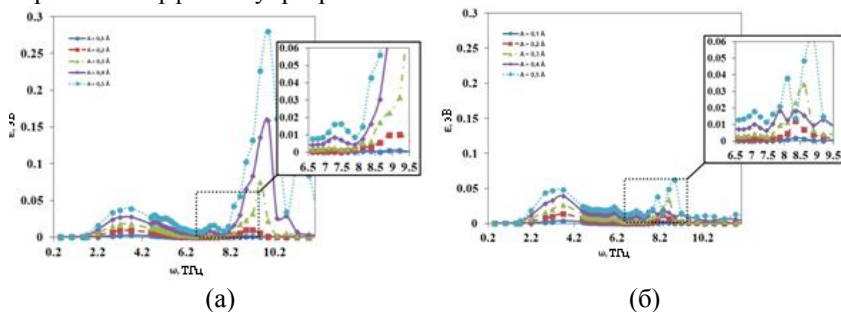


Рис. 2. Зависимость поглощенной энергии расчетной ячейкой на один атом за одну пикосекунду от частоты внешнего воздействия (1) и амплитуды. Для (а) воздействие осуществлялось вдоль кристаллографического направления $\langle 110 \rangle$, для (б), воздействие осуществлялось вдоль кристаллографического направления $\langle 111 \rangle$.

Полученные результаты для уравнений (1) – (3) имеют отличия. Далее проанализировано поведение первого слоя атомов вблизи

области воздействия. Для этого выбиралось по одному атому Pt и Al в этом слое и отслеживалась их динамика с течением времени для всего диапазона частот. Для частот близких к оптической ветви фононного спектра по гармоническому закону (1) более активно возбуждаются колебания на атоме Al, что свидетельствует о возбуждении дискретных бризеров, в то время как для выражений (2) и (3), такой активности не наблюдается. При этом для уравнения (1) происходит локальное расширение вблизи области воздействия, что свидетельствует о возбуждении дискретных бризеров.

4. Заключение

Методом молекулярной динамики для кристалла Pt_3Al рассмотрен механизм явления нелинейной супратрансмиссии для различных форм и направлений внешнего воздействия. Было показано, что транспорт энергии посредством данного механизма возможен вдоль направлений соответствующих кристаллографическим направлениям существования квази-бризера в кристалле и при воздействии по синусоидальному закону, в противном случае эффект сводился к минимуму. Полученные данные свидетельствуют, что вклад квази-бризеров в передачу энергии по кристаллу возрастает при увеличении амплитуды воздействия. Результаты проведенного исследования могут быть полезны при лазерной обработке материалов и обработке поверхности низкоэнергетической плазмой, а также в радиационном материаловедении.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Алтайского края в рамках научного проекта № 18-42-220002.

Литература

1. Geniet F., Leon J. Energy Transmission in the Forbidden Band Gap of a Nonlinear Chain // Phys. Rev. Lett. – 2002. – Vol. 89. – P. 134102.
2. Khomeriki R., Lepri S., Ruffo S. Nonlinear supratransmission and bistability in the Fermi-Pasta-Ulam model // Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys. – 2004. – Vol. 70. – P. 066626.
3. Evazzade I., Lobzenko I. P., Korznikova E. A., Ovid'ko I. A. et al. Energy transfer in strained graphene assisted by discrete breathers excited by external ac driving // Physical Review B. – 2017. – Vol. 95, No. 3. – P. 035423.
4. Yousefzadeh B. and Phani A. S. Supratransmission in a disordered nonlinear periodic structure // Journal of Sound and Vibration. – 2016. – Vol. 380. – P. 242-266.
5. Leon J. Nonlinear supratransmission as a fundamental instability // Physics Letters A. – 2003. – Vol. 319. – P. 130–136.

6. Chechin G. M., Dzhelauhova G. S., Mehonoshina E. A. Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers // *Physical Review E*. – 2006. – Vol. 74. – P. 036608.
7. Старостенков М.Д., Захаров П.В., Медведев Н.Н. Изучение посредством двумерной модели возможности существования нелинейных локализованных колебаний на границе биметалла Pt-Al // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2011. – Т. 8, № 8. – С. 40–44.
8. Захаров П. В., Старостенков М. Д., Ерёмин А. М., Корзникова Е. А., Дмитриев С. В. Возбуждение щелевых дискретных бризеров в кристалле состава A3B потоком частиц // *Физика твердого тела*. – 2017. – Т. 59, № 2. – С. 217–222.
9. Захаров П. В., Дмитриев С. В., Старостенков М. Д., Ерёмин А. М., Корзникова Е. А. Стационарные квазибризеры в монокристаллических металлах с ГЦК-структурой // *ЖЭТФ*. – 2017. – Т. 152, Вып. 5, № 11. – С. 1073–1080.
10. Захаров П. В., Старостенков М. Д., Ерёмин А. М., Чередниченко А. И. Дискретные бризеры в кристалле CuAu // *Письма о материалах*. – 2016. – Т. 6, № 4(24). – С. 294–299.
11. Zakharov P. V., Medvedev N. N., Starostenkov M. D., Eremin A. M. Prospects for the use of dynamic discrete breathers in nanofibers crystals stoichiometry A3B with the structure of L12 // 2015 International Siberian Conference on Control and Communications (SIBCON). Proceedings. – Omsk: Omsk State Technical University. Russia, Omsk, May 21–23, 2015. IEEE Catalog Number: CFP15794-CDR.
12. Medvedev N. N., Starostenkov M. D., Zakharov P. V., Dmitriev S. V. Exciting discrete breathers of two types in a computer 3D model of Pt₃Al crystal // *Technical physics letters*. – 2015. – Т. 41, No 10. – P. 994–997.
13. Старостенков М. Д., Потекаев А. И., Дмитриев С. В. и др. Динамика дискретных бризеров в кристалле Pt₃Al // *Известия высших учебных заведений. Физика*. – 2015. – Т. 58, № 9. – С. 136–140.
14. Zhou X. W., Johnson R. A. and Wadley H. N. G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers // *Physical Review B*. – 2004. – Vol. 69. – P. 144113.
15. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator [Electronic resource]: <http://lammps.sandia.gov/>.
16. Медведев Н. Н., Старостенков М. Д., Захаров П. В., Пожидаева О. В. Локализованные колебательные моды в двумерной модели упорядоченного сплава Pt₃Al // *Письма в Журнал технической физики*. – 2011. – Т. 37, № 3. – С. 7–15.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНОГО ПЛАВЛЕНИЯ МЕДИ

Герцен В.С., Демьянов Б.Ф.

Алтайский государственный технический университет,

Барнаул, Россия

E-mail: bfdemyanov@mail.ru

1. Введение

В настоящее время явление понижения температуры плавления нанокристаллических объектов при уменьшении их размеров не вызывает сомнений. Существует большое количество исследований этого эффекта для различных материалов, например [1,2]. Причиной понижения температуры плавления является то, что с переходом в нанометровый масштаб объемная доля поверхностных атомов становится сравнимой с объемной долей атомов, находящихся внутри нанобъекта. Поверхностные атомы в меньшей степени связаны друг с другом, что приводит к более легкому переходу поверхностного слоя в жидкое состояние [3].

Менее изученным является плавление поверхности в массивных материалах, хотя механизм плавления такой же как и в низкоразмерных объектах. Многие исследователи отмечают, что в реально наблюдаемых металлах из-за наличия поверхности процесс плавления имеет гетерогенный характер. Из-за изменения межатомного взаимодействия амплитуда колебаний атомов, расположенных на поверхности, существенно выше, чем в объеме. Плавление поверхности кристалла может происходить при температуре, значение которой ниже, чем для массивного материала. По некоторым данным она может достигать половину температуры плавления объемного материала. Таким образом, плавление как наноразмерных, так и массивных материалов начинается с поверхности, затем фронт расплава движется внутрь кристалла. Полное расплавление материала наступает при некоторой равновесной температуре, которая считается температурой плавления.

Целью настоящей работы является исследование особенностей явления гетерогенного плавления поверхности массивного материала на примере меди.

2. Методика эксперимента.

Медь марки М1 в исходном состоянии представляла прокатанный лист. Из листа вырезался образец в виде пластинки размером 10x10 мм. Одна из поверхностей пластинки механически полировалась непосредственно перед нагревом. При этом удалялась

оксидная пленка. Нагрев осуществлялся в вакууме при $T=950^{\circ}\text{C}$, что на 133 градуса ниже температуры плавления ($T_{\text{пл}}=1083^{\circ}\text{C}$) массивного материала меди. При нагреве обеспечивался вакуум 10^{-2} мм. Время выдержки при температуре 950°C составляло 8 часов. Охлаждение проводилось с печью путем естественного самопроизвольного охлаждения с сохранением вакуума. Поверхность термообработанных образцов исследовались в оптическом микроскопе Люмам-8Р.

3. Результаты исследований.

На рис. 1 приведена микрофотография поверхности образца после нагрева. Видно, что присутствует большое количество частиц, имеющих равноосную форму близкую к сферической. Подсчет частиц показал, что в этой области плотность частиц составляет $\rho=0,014 \text{ мкм}^{-2}$. Средний размер частиц равен 5 мкм. Необходимо отметить, что для статистической обработки выбирались зерна с наиболее крупными частицами. Часто присутствуют области заполненные частицы с размерами около 1 мкм, что затрудняет их измерение, т.к. их размеры находятся на пределе разрешения оптического микроскопа.

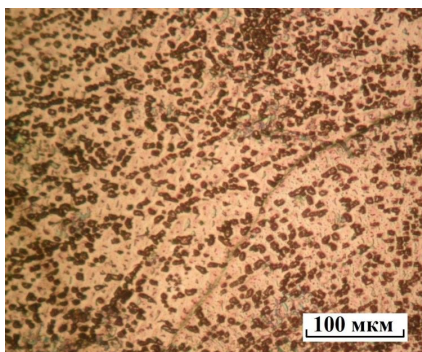


Рис. 1. Структура поверхности меди после отжига 950°C

Образование сферических частиц на поверхности меди может быть связано с поверхностным плавлением. Превращения на поверхности при нагреве схематически показаны на рис. 2. Поверхность поликристаллического металла состоит из участков с различной кристаллографической ориентацией. На рис. 2а показана поверхность до нагрева, это плоская поверхность, состоящая из поверхностей зерна 1 и зерна 2. Зерна произвольно ориентированы, поэтому свойства их поверхностей могут существенно отличаться. В частности, они имеют различную поверхностную энергию. Поэтому температура плавления этих поверхностей также будет отличаться.

При нагреве поверхность одного из зерен будет плавиться при более низкой температуре. На рис. 2b показано начало поверхностного плавления, плавятся зерна с самой высокой поверхностной энергией. При увеличении температуры плавление происходит по всей поверхности (рис. 2c), однако, толщина расплавленного слоя будет варьировать от зерна к зерну. При длительной выдержке слой расплава станет однородным по всей поверхности образца (рис. 2d). Возможно, плавление поверхности начинается с границ зерен. Границы зерен, обладая высокоэнергетической структурой, начинают плавиться при более низкой температуре по сравнению с областью внутри зерна [4].

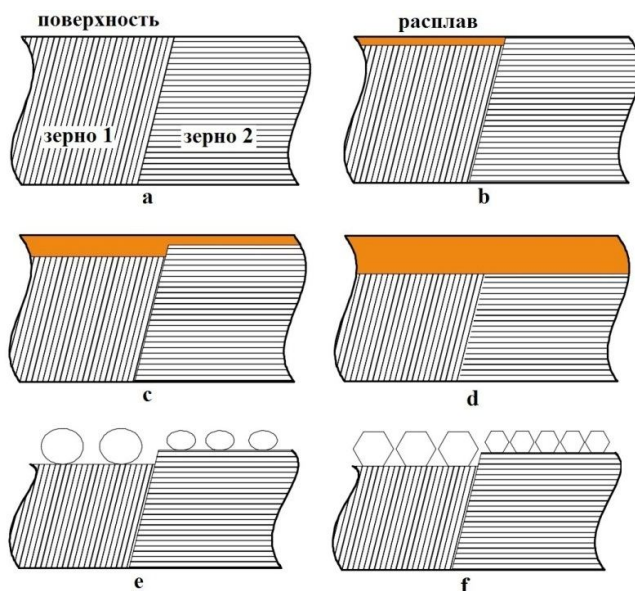


Рис. 2. Стадии образования частиц при поверхностном плавлении.

Наши исследования показали, что при 950°C происходит плавление поверхностного слоя меди. Образуется тонкая жидкая пленка. Под действием сил поверхностного натяжения жидкая пленка разрывается и собирается в сферические капли (рис. 2e). Движущей силой образования капель является понижение поверхностной энергии. Зная плотность частиц и их размер можно определить толщину расплавленного слоя. Суммарный объем частиц V равен объему

расплавленного слоя толщиной h . Считая частицы сферическими, толщину слоя можно оценить из соотношения:

$$V = \rho S \frac{4}{3} \pi R^3 = Sh \quad (1)$$

где ρ – плотность частиц, S – площадь поверхности, h – толщина расплава, R – средний радиус частиц.

Оценка, проведенная для области, показанной на рис. 1, со средним размером частиц 5 мкм, дала значение $h=800$ нм.

Охлаждение образца приводит к кристаллизации капель. В результате форма капель может остаться сферической либо приобрести огранку (рис. 2f). Такие ограненные кристаллы показаны на рис. 3. На рис. 3 показана область с самыми крупными частицами, обнаруженными в наших образцах. Измерения показали, что средний размер частиц в указанной области составляет 7 мкм.

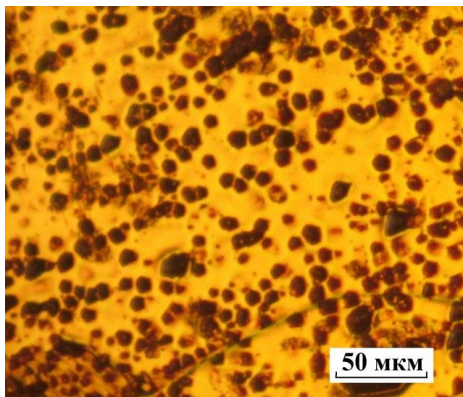


Рис. 3. Огранка частиц после кристаллизации.

4. Заключение

Проведенные исследования подтверждают положение о том, что процесс плавления реальных объектов является гетерогенным, поскольку реальные объекты всегда обладают поверхностью. Слой жидкости на поверхности твердой фазы возникает при температурах, меньших справочной равновесной температуры плавления объемного материала. Толщина жидкого слоя на поверхности зависит от температуры и структуры поверхности. Процесс поверхностного плавления сопровождается распадом тонкой пленки на капли и образованием ограненных или сферических частиц в субмикрометровом диапазоне.

В меди процесс поверхностного плавления является хорошо выраженным уже при $T=950^{\circ}\text{C}$, что на 133 градуса ниже температуры плавления массивного материала. При этом расплавленный слой разбивается на капли, размер которых зависит от кристаллографической ориентации поверхности. Размер образующихся кристаллов имеет порядок 1 мкм, наиболее крупные кристаллы достигает 7 мкм. Плотность кристаллов составляет $\rho=0,014 \text{ мкм}^{-2}$. Оценка максимальной толщины расплавленного слоя показывает значение 800 нм.

Литература

1. Берри Р.С., Смирнов Б.М. Фазовые переходы в кластерах различных типов//Успехи физических наук, 2009, т. 179, № 2, с. 147 – 177.
2. Aguado A., Jarrold M.F. Melting and freezing of metal clusters//Annual Review of Physical Chemistry, 2011, v. 62, p. 151 – 172.
3. Гусев А.И. Ремпель А.А. Нанокристаллические материалы – М.: Физматлит, 2001. – 224 с.
4. Векман А.В., Демьянов Б.Ф., Драгунов А.С. Моделирование процесса плавления границ зерен в алюминии// Известия высших учебных заведений. Физика, 2015, т. 58, № 12, с. 58-65.

ПЛАВЛЕНИЕ ТОНКИХ ПЛЕНОК ОКСИДА МЕДИ

Рыжков П.Д., Демьянов Б.Ф.

Алтайский государственный технический университет,

Барнаул, Россия

E-mail: bfdemyanov@mail.ru

1. Введение.

Окисление металлов приводит к образованию тонких оксидных пленок различного состава. Медь представляет интерес в связи с широким промышленным применением. Медь является основным материалом для электроники и электротехники из-за низкого сопротивления, однако она имеет существенный недостаток - низкую стойкость к окислению. Присутствие оксидной пленки, а также ее неконтролируемый рост может оказывать негативное влияние на работу элементов электроники [1]. Образующаяся оксидная пленка может рассматриваться как низкоразмерная система. Уменьшение размеров кристаллов и переход из нанометровый диапазон сопровождается, в частности, понижением температуры плавления [2,3]. Проблема влияния размеров и формы систем пониженной

размерности на их физические и химические свойства в последнее время приобрела ключевой характер в связи с мировой тенденцией технологического освоения нанометрового диапазона размеров при создании новых материалов, структур и приборов. Уменьшение размеров элементов микроэлектроники приводит к значительному увеличению выделения тепла с единицы площади и в то же время к снижению термической стабильности этих элементов в связи с возрастанием вклада поверхности. Таким образом, задача термической стабильности малоразмерных систем в процессе эксплуатации является актуальной.

Целью настоящей работы является исследование закономерностей поведения тонкопленочных систем нанометрового диапазона размеров при воздействии на них термического нагрева на примере окисной пленки Cu_2O на поверхности меди. Объектом исследования являлись тонкие пленки Cu_2O , сформированные на поверхности меди в течение 1 года и 20 лет.

2. Методика приготовления и исследования образцов.

Для исследований использовалась медь марки М1. Оксидная пленка разной толщины была получена путем естественного роста на образцах меди в воздухе при нормальных условиях. Использовались три образца. Исходный, эталонный образец, имел механически полированную поверхность, подготовленную непосредственно перед термообработкой. Образовавшаяся за непродолжительное время оксидная пленка не превышала нескольких нанометров.

Два других образца имели оксидную пленку разной толщины. Образец, обозначенный как Cu_2O -I, выдерживался в течение 1 года, образец Cu_2O -II имел выдержку более 20 лет. Оксидная пленка в первом случае имела красноватый цвет, во втором случае – темно-коричневый цвет. Измерение толщины оксидной пленки представляет трудную задачу и в настоящей работе не проводилось. Образцы подвергались изотермическому нагреву при температуре 950°C в течение 8 часов. Термообработка проводилась в вакууме при давлении 0,5 Па. После термообработки образцы охлаждались с печью с сохранением вакуума. Поверхность образцов исследовалась под оптическим микроскопом Люмам-8Р.

3. Результаты исследования.

Исследование эталонного образца не обнаружило на поверхности кристаллов Cu_2O . Микроструктура поверхности образцов Cu_2O -I и Cu_2O -II приведена на рис. 1. Видно, что на поверхности меди присутствуют кристаллы оксида меди Cu_2O . Кристаллы имеют

огранку, что соответствует ковалентному типу связей в решетке Cu_2O . Количество кристаллов в образце Cu_2O -II с толстой пленкой (рис. 1а) значительно больше, чем в образце Cu_2O -I с тонкой пленкой (рис 1b).

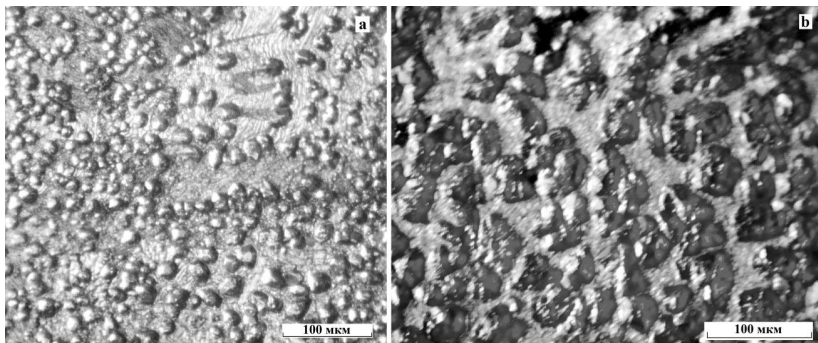


Рис. 1. Микроструктура поверхности образцов Cu_2O -I (а) и Cu_2O -II (b).

Была проведена статистическая обработка кристаллов. Определены структурные характеристики – поверхностная плотность кристаллов ρ и их средний размер d . Результаты приведены в табл. 1.

Таблица 1.

Структурные характеристики поверхности

Образец	ρ , 1/мкм ²	$d_{\text{ср}}$, мкм	h , нм
Cu_2O -I	0,0013	12	590
Cu_2O -II	0,0017	16	1500

Образование кристаллов на поверхности меди произошло в результате плавления оксидной пленки при нагреве. Процесс образования кристаллов Cu_2O схематически показан на рис. 2. В исходном состоянии оксидная пленка может иметь поликристаллическую структуру (рис. 2а). Это приводит к присутствию в системе, кроме свободной поверхности, зернограничной поверхности и поверхности раздела пленка-подложка. Наличие трех типов поверхностей может оказать влияние на кинетику плавления и каплеобразования пленки. При достижении некоторой температуры начинается поверхностное плавление. Образуется тонкий слой жидкости на свободной поверхности. Также происходит образование жидкой прослойки по границам зерен и по границе раздела медь-оксид меди (рис 2b).

При достижении температуры 950°C пленка Cu_2O переходит в жидкое состояние (рис. 2с). Плавление тонких пленок происходит при температуре существенно ниже температуры плавления массивного материала [4]. Табличная температура плавления оксида Cu_2O составляет 1242°C. В наших экспериментах температура плавления тонкой пленки на 292 градуса ниже табличного значения. На следующем этапе слой жидкости разбивается на капли (рис. 2d). Движущей силой каплеобразования является стремление системы к минимуму поверхностной энергии. Можно предположить присутствие эффекта смачивания между подложкой меди и каплями Cu_2O . Угол смачивания близок к 90°, о чем свидетельствует вид кристаллов близкий к полусферической форме. При охлаждении происходит кристаллизация капель, они, в целом сохраняя полусферическую форму, приобретают огранку (рис. 2е).

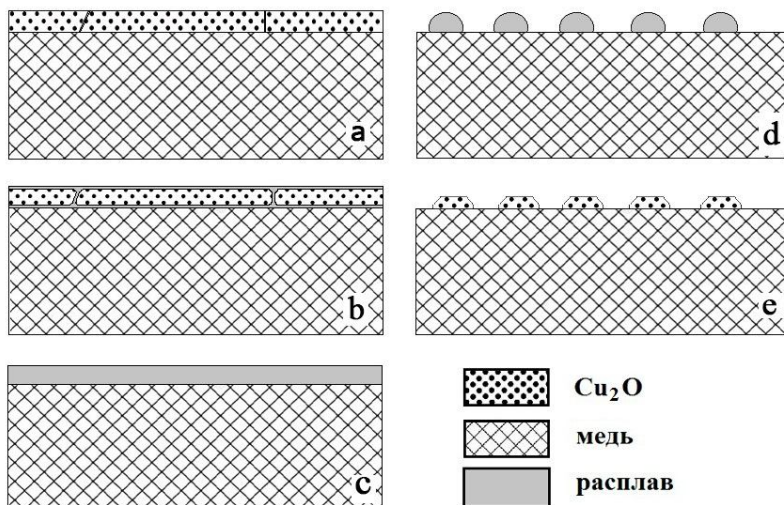


Рис. 2. Стадии образования кристаллов Cu_2O .

Используя значения поверхностной плотности кристаллов и их размера можно оценить толщину исходной оксидной пленки. Суммарный объем кристаллов V равен объему оксидной пленки толщиной h . В первом приближении можно считать форму кристаллов полусферической, тогда толщину пленки можно оценить из соотношения:

$$V = \rho S \frac{2}{3} \pi R^3 = Sh \quad (1)$$

где ρ – поверхностная плотность кристаллов, S – площадь поверхности, h – толщина оксидной пленки, R – средний радиус кристаллов. Отсюда получим:

$$h = \frac{2}{3} \rho \pi R^3 \quad (2)$$

Оценка, проведенная для кристаллов, показанных на рис. 1, со средним размером частиц 12 мкм и 16 мкм, дала значение $h=590$ нм и 1500 нм, соответственно. Результаты расчетов приведены в таблице 1. Необходимо отметить, что полученные значения толщины исходной оксидной пленки являются завышенными, т.к. объем кристалла меньше объема полусферы, кристалл имеет уплощенную форму, как показывают исследования в электронном микроскопе [5].

4. Заключение.

В работе проведено экспериментальное исследование плавления тонкой оксидной пленки Cu_2O на поверхности меди при воздействии на нее нагрева при температуре существенно ниже температуры плавления массивного кристалла Cu_2O . После нагрева до температуры 950°C , на поверхности образцов формируются кристаллы равноосной формы, обладающие огранкой. Измерены средние размеры кристаллов. Выявлено, что размер кристаллов зависит от толщины пленки и составляют, соответственно, 12 мкм и 16 мкм. Определена поверхностная плотность кристаллов.

Установлено, что основной причиной образования кристаллов при нагреве, является распад на капли тонкой оксидной пленки. Выявлены кинетические особенности процесса распада тонких пленок никеля на капли. Установлено, что процесс распада на капли происходит в некотором температурно - временном интервале. Обоснован механизм этого явления с учетом гетерогенного плавления.

Литература.

1. Gryzunova N. N., Vikarchuk A. A., Bekin V. V., Firsov V. S., Gryzunov A. M. Nanowhisker structures of copper oxide under conditions of exposure to temperature fields and corrosive media// Letters on Materials, 2018, v. 8, n.3, p. 294-298.
2. Комник Ю.Ф. Физика металлических пленок. Размерные и структурные эффекты. Атомиздат, М.-1979.- 264 с.
3. Гусев А.И., Ремпель А.А. Нанокристаллические материалы. Физматлит, М.- 2001. -224 с.
4. Громов Д.Г., Гаврилов С.А., Редичев Е.Н., Аммосов Р.М. Кинетика процесса плавления-диспергирования тонких пленок меди//Физика твердого тела, 2007, т. 49, в. 1, с. 172-178.

5. Zhou G.W. TEM investigation of interfaces during cuprous island growth//Acta Materialia, 2009, v. 57, p. 4432–4439.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ УПРУГОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА СКОРОСТЬ МИГРАЦИИ ГРАНИЦ НАКЛОНА В НИКЕЛЕ

Зоря И.В.¹, Полетаев Г.М.², Старостенков М.Д.², Полетаев Я.Г.²

¹*Сибирский государственный индустриальный университет,
Новокузнецк, Россия*

²*Алтайский государственный технический университет им. И.И.
Ползунова, Барнаул, Россия
E-mail: gmpoletaev@mail.ru*

Миграция границ зерен – перемещение границы по нормали к ее поверхности. Миграция границ имеет определяющее значение в развитии рекристаллизации, во многих фазовых превращениях. К настоящему времени известны многие основные закономерности миграции границ зерен в зависимости от разных факторов [1, 2]. Величина подвижности определяется типом и структурой границы, температурой, наличием различных дефектов. С ростом температуры подвижность границ увеличивается, причем исследователи отмечают, что на температурной зависимости подвижности имеется, как правило, два, или даже три, интервала с различными энергиями активации миграции [1-3]. В области высоких температур наблюдается более низкая энергия активации. Многие исследования, выполненные как на металлах с кубической, так и гексагональной кристаллической решеткой, показали, что с ростом угла разориентации зерен подвижность границ в целом увеличивается. В работах [4, 5] отмечается, что самыми подвижными границами в металлах с ГЦК решеткой, по сравнению со всеми другими границами, являются границы наклона $\langle 111 \rangle$ с углом разориентации 38° . Вместе с тем относительно энергии активации миграции границ до сих пор есть разногласия. Например, в [1, 2] говорится, что энергия активации почти монотонно уменьшается при увеличении угла разориентации в диапазоне малоугловых границ. Однако в [6, 8] результаты экспериментов по миграции границ наклона показали, что малоугловые границы с одной и той же осью разориентации имеют почти одинаковую энергию активации миграции в широком диапазоне

углов разориентации, что косвенно свидетельствует об одинаковом элементарном механизме миграции таких границ.

Немوتря на давний интерес к проблеме миграции границ и рекристаллизации, в настоящее время остается много вопросов, связанных, в частности, с механизмом миграции на атомном уровне для разных типов границ, влиянием на кинетику миграции различных дефектов кристаллической структуры, деформации. В [9, 10] было установлено, что подвижность границ заметно уменьшается с повышением давления, причем для границ разного типа, произвольных и специальных, этот эффект отличался. В связи с этим возникает вопрос как именно влияет деформация на подвижность границ разного типа. Настоящая работа посвящена исследованию методом молекулярной динамики влияния деформации вдоль различных направлений относительно мигрирующей границы на скорость миграции границ наклона с осями разориентации $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ в типичном металле с ГЦК кристаллической решеткой – никеле.

В работе за основу была взята методика исследования миграции границы зерен наклона, предложенная и развитая в работах [2, 6]. В данном случае создается четко аттестованная граница U-образной формы (рис. 1а) (ось разориентации совпадает с осью Z). Сила поверхностного натяжения границы, возникающая вследствие стремления границы минимизировать свою энергию, является причиной направленного перемещения границы в сторону уменьшения ее площади [11–13]. Сила, провоцирующая миграцию, и скорость миграции границы остаются в рассматриваемой модели постоянными в течение почти всего движения границы, плавно уменьшаясь к концу компьютерного эксперимента, что позволяет достаточно просто проводить измерение скорости миграции. На рис. 1 (б) приведен пример изменения положения границы наклона $\langle 111 \rangle$ с углом разориентации 30° после молекулярно-динамического эксперимента в течение 200 пс.

В [14–16] похожая модель использовалась для моделирования методом молекулярной динамики миграции тройного стыка границ зерен. В [15, 16] моделирование проводилось в двумерной модели. Следует заметить, что относительно механизма миграции границ зерен, особенно малоугловых, двумерная и трехмерная модели имеют принципиальное отличие. В двумерной модели зернограницные краевые дислокации не имеют периодически расположенных вдоль ядер дислокаций изломов, которые играют важную роль в зернограницных процессах, особенно диффузии [17]. Поэтому в

настоящей работе было принято решение создать трехмерный расчетный блок в молекулярно-динамической модели в виде пластины толщиной в 12 атомных плоскостей (рис. 1а). Этой толщины вполне достаточно для появления эффектов, связанных с изломами зернограницных дислокаций. В случае границ наклона $\langle 111 \rangle$ расчетный блок никеля имел высоту 18.0 nm, ширину 12.0 nm и толщину 2.4 nm. Для границ $\langle 100 \rangle$ размеры составляли 18.2 nm, 12.1 nm и 2.2 nm соответственно. Блоки содержали примерно 50000 атомов. Вдоль оси Z (рис. 1а) имитировалось бесконечное повторение структуры, т.е. были наложены периодические граничные условия. На краю расчетного блока границы зерен должны быть зафиксированы, что подразумевает сохранение ориентации кристаллической решетки двух разных зерен на границе блока. В связи с этим по осям X и Y границы блока (выделены темно-серым цветом на рис. 1а) были жестко закреплены для фиксации заданной разориентации зерен.

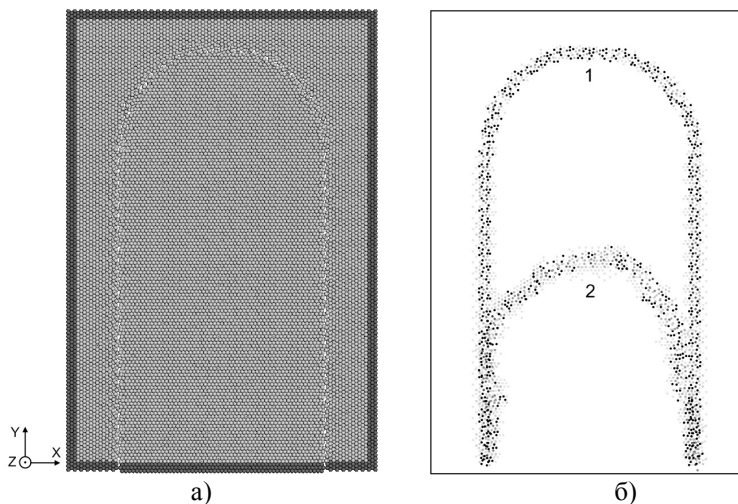


Рис. 1. Расчетный блок, содержащий границу наклона $\langle 111 \rangle$ 30° : а) вид на плоскость XY в начальный момент времени (атомы, которые оставались неподвижными в течение компьютерного эксперимента окрашены в темно-серый цвет); б) начальное положение границы (1) и положение после моделирования в течение 200 пс при температуре 1700 K (2), показанные с помощью визуализатора свободного объема.

Для описания межатомных взаимодействий использовались многочастичные потенциалы Клери-Розато [18], построенные в приближении сильной связи. Потенциалы данного типа неоднократно использовались в молекулярно-динамических моделях и прошли апробацию по большому числу характеристик [19–22]. Опыт их применения показывает, что с их помощью удастся описать разнообразные свойства металлов и сплавов. Шаг интегрирования по времени в методе молекулярной динамики был равен 2 фс. Температура в модели задавалась через начальные скорости атомов согласно распределению Максвелла, при этом учитывалось тепловое расширение расчетных блоков. Для сохранения температуры постоянной в процессе моделирования использовался термостат Нозе-Гувера.

В работе рассматривалось влияние одноосной деформации вдоль осей X, Y, Z на скорость миграции границ. Одноосная деформация в модели задавалась в начале компьютерного эксперимента путем изменения соответствующих межатомных расстояний вдоль одной из осей.

На рис. 2 приведены зависимости скорости миграции границ наклона $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ от угла разориентации. Измерение скорости миграции границ зерен проводилось при температуре 1700 К. При этой температуре, близкой к температуре плавления никеля, миграция границ с углом разориентации выше 10° происходила с достаточно высокой скоростью, чтобы ее можно было измерять в молекулярно-динамической модели. Специальные и симметричные границы в настоящей работе не рассматривались.

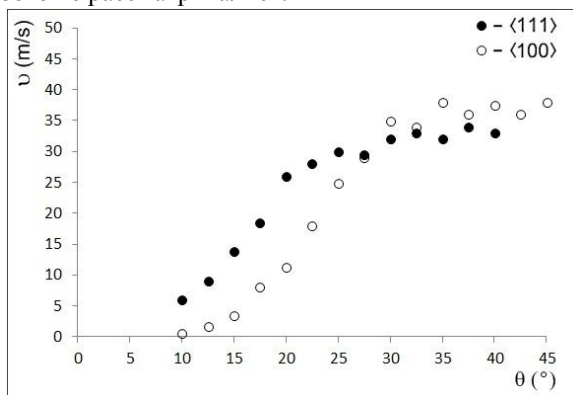


Рис. 2. Скорость миграции границ наклона при температуре 1700 К в зависимости от угла разориентации θ в никеле.

Поверхностное натяжение границ зерен пропорционально их энергии. С ростом угла разориентации растет энергия и натяжение [2, 13], в связи с чем увеличивается и сила, провоцирующая миграцию границы. Для большеугловых границ энергия примерно одинакова, что характерно, по мнению многих авторов, для большого класса большеугловых границ и границ смешанного типа, в связи с чем, например, большинство углов между границами в тройных стыках близки к 120° [23, 24].

Угол разориентации зерен θ варьировался от 10° до 45° для границ $\langle 100 \rangle$ и до 40° для границ $\langle 111 \rangle$. В случае границ $\langle 100 \rangle$ 45° – это максимальный угол разориентации. В случае границ $\langle 111 \rangle$ принимался во внимание тот факт, что наибольшей подвижностью, согласно, например [4, 5], обладают границы наклона $\langle 111 \rangle$ с углом разориентации 38° . С ростом угла разориентации скорость миграции границ возрастала, что является известной закономерностью [1, 2]. Следует обратить внимание, что при углах разориентации выше 25° большеугловые границы $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ мигрируют приблизительно с одной скоростью (30–37 м/с при температуре 1700 К), тогда как скорости миграции малоугловых границ наклона $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ отличаются существенно – малоугловые границы $\langle 100 \rangle$ мигрируют примерно в два раза медленнее границ $\langle 111 \rangle$, что объясняется, по всей видимости, различием дислокационной структуры рассматриваемых границ.

На рис. 3 приведены полученные в модели зависимости скорости миграции границ наклона $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ с углом разориентации 30° от степени деформации отдельно вдоль осей X, Y и Z. Деформация рассматривалась упругая: от 3% одноосного сжатия (отрицательные значения ϵ на рис. 3) до 3% растяжения (положительные значения). В молекулярно-динамической модели при данных значениях деформации пластические сдвиги не инициировались.

В первую очередь, следует обратить внимание на то, что почти во всех случаях, как при упругой деформации сжатия, так и при растяжении, скорость миграции рассматриваемых границ замедлялась. Данный результат не является тривиальным и, по всей видимости, не связан с изменением свободного объема при упругой деформации [25], который, как известно, в значительной степени влияет на диффузионные процессы. Действительно, при растяжении доля свободного объема увеличивается, и такие процессы, как, например, переползание дислокаций, диффузия вдоль дислокационных ядер

должны контролироваться степенью деформации. Особенно выделяется «аномальная» зависимость подвижности границ $\langle 111 \rangle$ от деформации вдоль оси Z: при сжатии вдоль оси Z на 3% скорость миграции границ $\langle 111 \rangle$ с углом разориентации 30° увеличилась вдвое, а при растяжении – напротив, почти вдвое уменьшилась. В случае границы наклона $\langle 100 \rangle$ все три зависимости (при деформации вдоль осей X, Y, Z) оказались одинаковы (рис. 3б).

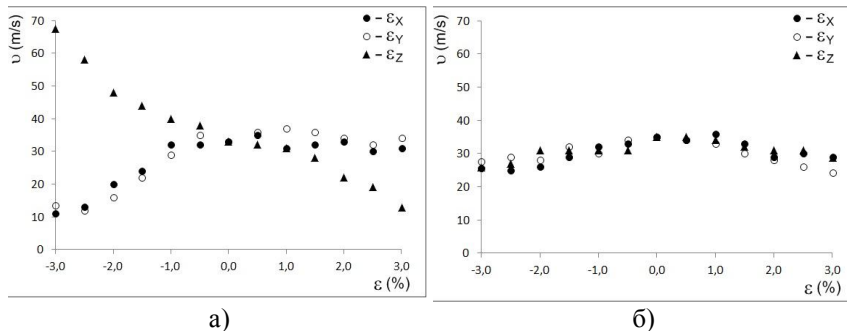


Рис. 3. Скорость миграции границ наклона $\langle 111 \rangle$ (а) и $\langle 100 \rangle$ (б) с углом разориентации 30° в зависимости от деформации вдоль осей X (ε_x), Y (ε_y), Z (ε_z) при температуре 1700 K.

Полученные зависимости свидетельствуют в пользу того, что механизм миграции рассматриваемых границ зерен не содержит диффузионных элементов, т.е. осуществляется не за счет переползания дислокаций, одиночных миграций атомов, а, по всей видимости, протекает путем коллективных атомных перестановок, например, сдвигов, скольжений и расщеплений зернограницных дислокаций.

Таким образом, в настоящей работе с помощью метода молекулярной динамики проведено исследование влияния деформации вдоль различных направлений относительно мигрирующей границы на скорость миграции границ наклона с осями разориентации $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ в никеле. Показано, что большеугловые границы наклона $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ мигрируют приблизительно с одной и той же скоростью, тогда как подвижность малоугловых границ отличается значительно: малоугловые границы $\langle 111 \rangle$ мигрируют примерно в два раза быстрее границ $\langle 100 \rangle$. В работе получено, что почти во всех случаях, как при упругой деформации сжатия, так и при растяжении, скорость миграции рассматриваемых границ замедлялась. Исключением являлся случай деформации вдоль оси наклона границы $\langle 111 \rangle$. При сжатии вдоль оси наклона граница $\langle 111 \rangle$ мигрировала быстрее, при растяжении,

наоборот, медленнее. Полученные результаты свидетельствуют в пользу того, что миграция границ наклона осуществляется не за счет диффузионных процессов, как, например, переполюзания дислокаций, одиночных миграций атомов, а, по всей видимости, путем коллективных атомных перестановок: сдвигов, скольжений и расщеплений зернограницных дислокаций.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки РФ в рамках базовой части государственного задания (проект № 3.4820.2017/БЧ).

Список используемой литературы

1. Кайбышев О.А., Валиев Р.З. Границы зерен и свойства металлов. – М: Металлургия, 1987. – 216 с.
2. Gottstein G., Shvindlerman L.S. Grain Boundary Migration in Metals: Thermodynamics, Kinetics, Applications. Second Edition. – Boca Raton: CRC Press, 2009. – 711 p.
3. Хесснер Ф., Хофман С. В кн.: Рекристаллизация металлических материалов: Пер. с англ. – М.: Металлургия, 1982. – С. 71–102.
4. Huang Y., Humphreys F.J. Measurements of grain boundary mobility during recrystallization of a single-phase aluminium alloy // Acta Materialia. 1999. Vol. 47. P. 2259–2268.
5. Huang Y., Humphreys F.J. The effect of solutes on grain boundary mobility during recrystallization and grain growth in some single-phase aluminium alloys // Materials Chemistry and Physics. 2012. Vol. 132. P. 166–174.
6. Gottstein G., Molodov D.A., Shvindlerman L.S. Grain boundary migration in metals: recent developments // Interface Science. 1998. Vol. 6. P. 7–22.
7. Winning M., Rollett A.D., Gottstein G., Srolovitz D.J., Lim A., Shvindlerman L.S. Mobility of low-angle grain boundaries in pure metals // Philosophical Magazine. 2010. Vol. 90. P. 3107–3128.
8. Molodov D.A., Ivanov V.A., Gottstein G. Low angle tilt boundary migration coupled to shear deformation // Acta Materialia. 2007. Vol. 55. P. 1843–1848.
9. Molodov D.A., Straumal B.B., Shvindlerman L.S. Effect of pressure on the $\langle 001 \rangle$ -tilt-boundary migration in tin bicrystals // Физика твердого тела. 1984. Т. 26. №4. С. 1033–1037.

10. Molodov D.A., Straumal B.B., Shvindlerman L.S. The effect of pressure on migration of $\langle 001 \rangle$ tilt grain boundaries in tin bicrystals // Scripta Materialia. 1984. Vol. 18. P. 207–211.
11. Yang C.C., Rollett A.D., Mullins W.W. Measuring relative grain boundary energies and mobilities in an aluminum foil from triple junction geometry // Scripta Materialia. 2001. Vol. 44. P. 2735–2740.
12. Rollett A.D., Yang C.C., Mullins W.W. et al. Grain boundary property determination through measurement of triple junction geometry and crystallography // Int. Conf. on Grain Growth and Recrystallization, Aachen, Germany, 2001. – P. 165–176.
13. Штремель М.А. Прочность сплавов. Ч. 1. Дефекты решетки. – М.: Металлургия, 1982. – 280 с.
14. Gottstein G., Sursaeva V., Shvindlerman L. The effect of triple junctions on grain boundary motion and grain microstructure evolution // Interface Science. 1999. Vol. 7. P. 273–283.
15. Upmanyu M., Srolovitz D.J., Shvindlerman L.S., Gottstein G. Triple junction mobility: a molecular dynamics study // Interface Science. 1999. Vol. 7. P. 307–319.
16. Upmanyu M., Srolovitz D.J., Shvindlerman L.S., Gottstein G. Molecular dynamics simulation of triple junction migration // Acta Materialia. 2002. Vol. 50. P. 1405–1420.
17. Starostenkov M.D., Sinyaev D.V., Rakitin R.Yu., Poletaev G.M. Diffusion mechanisms near tilt grain boundaries in Ni_3Al intermetallide // Solid State Phenomena. 2008. Vol. 139. P. 89–94.
18. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // Physical Review B. 1993. Vol. 48. P. 22–33.
19. Poletaev G.M., Novoselova D.V., Kaygorodova V.M. The causes of formation of the triple junctions of grain boundaries containing excess free volume in fcc metals at crystallization // Solid State Phenomena. 2016. Vol. 249. P. 3–8.
20. Poletaev G., Zorya I., Rakitin R. Molecular dynamics study of migration mechanism of triple junctions of tilt boundaries in fcc metals // Computational Materials Science. 2018. V.148. P. 184–189.
21. Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Структурные изменения тетраэдров дефектов упаковки при поглощении точечных дефектов // Письма в ЖТФ. 2009. Т.35. №1. С. 3–10.
22. Полетаев Г.М., Кулабухова Н.А., Старостенков М.Д. Потенциалы межатомного взаимодействия в системах Pd-H и Ni-H // Химическая физика и мезоскопия. 2011. Т.13. №3. С. 411–418.

23. Fortes M.A., Deus A.M. Effects of triple grain junctions on equilibrium boundary angles and grain growth kinetics // Materials Science Forum. 2004. Vol. 455–456. P. 648–652.

24. Perevalova O.B., Kononova E.V., Koneva N.A., Kozlov E.V. Energy of grain boundaries of different types in fcc solid solutions, ordered alloys and intermetallics with $L1_2$ superstructure // Journal of Materials Science and Technology. 2003. Vol. 19. P. 593–596.

25. Tucker G.J., Tschopp M.A., McDowell D.L. Evolution of structure and free volume in symmetric tilt grain boundaries during dislocation nucleation // Acta Materialia. 2010. Vol. 58. P. 6464–6473.

NaCl + CsCl: ЭФФЕКТИВНАЯ СРЕДА ДЛЯ ОТЖИГА КРИСТАЛЛОВ АЛМАЗА ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ

Ишутин И.А.^{1,2}, Чепуров А.А.²

¹НГТУ, Новосибирск

²ИГМ СО РАН им В.С. Соболева, Новосибирск

E-mail: achepurov@igm.nsc.ru

Алмаз отличается многими уникальными свойствами: высокой твердостью, химической, механической и радиационной стойкостью, теплопроводностью. Все это делает алмаз перспективным материалом для применения в промышленности и различных областях техники [1]. В течение длительного времени доступными были только природные алмазы [2], но во второй половине 20-го века были разработаны методы получения синтетических монокристаллов алмазов, в первую очередь это относится к алмазам, выращиваемым из расплавов металлов – НРНТ алмазы (High Pressure High Temperature) [3]. Получаемые монокристаллы варьируются по морфологии, окраске и ряду физических свойств, что отражает условия их получения и присутствующих в них примесных дефектов. Изучением структурных дефектов в алмазе занимаются давно [4, 5], как с целью оценки генетического происхождения алмазов в природе, так и решая задачу управления определенными примесными центрами для получения кристаллов алмаза с заданными характеристиками [6].

Отжиг кристаллов алмаза является одним из наиболее эффективных способов воздействия на алмаз, стимулирует перестройку дефектов, способен изменять свойства алмазов и в ряде случаев значительно их улучшать [7]. Для отжига алмазов необходимо высокая температура, которая в большинстве случаев находится в интервале 1300-1800°C. При таких экстремальных температурах алмаз

в обычных условиях превратиться в графит, или попросту сгорит. Для предотвращения этого процесса, отжиг кристаллов алмаза проводят при условиях, отвечающих области его стабильности, т.е. при высоком давлении. В большинстве случаев давление находится в интервале 5-7 ГПа. Условия высокого давления обеспечивают сохранность алмаза и возможность трансформации дефектов в его структуре.

Для создания высокого давления в мировой практике используют различные типы аппаратов высокого давления [8]. Большинство из них позволяют создавать требуемые параметры в объеме, достаточном для помещения туда кристаллов алмаза, хотя существуют аппараты высокого давления, имеющие очень малый размер рабочих ячеек. Средой, в которую помещают алмаз для отжига, чаще всего являются тугоплавкие оксиды, которые при этом не взаимодействуют с алмазом [9]. При этом существует ряд проблем. Основная проблема заключается в том, что алмаз, несмотря на его высокую твердость, является достаточно хрупким материалом. Возникающие при отжиге алмаза напряжения могут образовать трещины в кристалле, в результате чего, алмаз раскалывается на несколько отдельных частей. В большинстве случаев, эту проблему пытаются избежать методом предварительной сошлифовки острых углов на кристаллах алмаза, либо применением заготовок изометричной формы. Тем не менее, в ряде случаев требуется подвергнуть отжигу алмаз в форме пластин, что значительно повышает

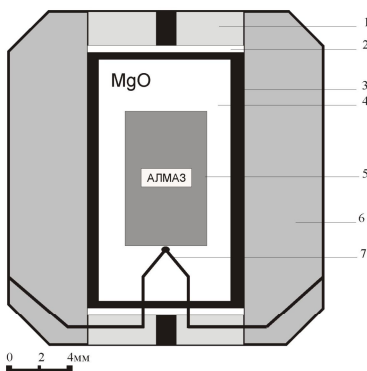


Рис. 1. Схема ячейки высокого давления: 1 - торцевая шайба с токовводом; 2 - молибденовый диск; 3 - нагреватель; 4 - MgO; 5 - образец из смеси NaCl+CsCl с алмазом; 6 - контейнер; 7 - термопара.

риск возникновения трещин в таком кристалле. В данной работе мы

изучали возможность отжига кристаллов алмаза при высоком давлении и температуре в среде $\text{NaCl}+\text{CsCl}$.

Эксперименты проведены на многопуансонном аппарате высокого давления типа «разрезная сфера» (БАРС) [10] в ячейках высокого давления (ЯВД), изготовленных из тугоплавких оксидов ZrO_2 , CaO и MgO с трубчатым графитовым нагревателем диаметром 11 мм. ЯВД изготавливали в виде прямоугольного параллелепипеда размером $20 \times 20 \times 23$ мм. Передача электротока на нагреватель осуществлялась через молибденовые стержни и диски. Схема сборки реакционного объема ячейки приведена на Рис. 1.

От нагревателя образцы изолировали втулкой из MgO с толщиной стенки 1 мм, а сверху и снизу – шайбами из MgO высотой 2 мм. Образцом служил кристалл алмаза, запрессованный в шайбу из смеси $\text{NaCl}+\text{CsCl}$ в соотношении 50/50. Процедура подготовки образца следующая. Синтетический монокристалл алмаза был изготовлен шлифованием в виде пластины размером $4 \times 4 \times 1$ мм. Кристалл алмаза не имел видимых дефектов: трещин или включений металла-катализатора. В прессформу засыпали мелкозернистый порошок NaCl , устанавливали алмаз таким образом, чтобы он не касался стенок прессформы и опрессовывали. В итоге получали шайбу из смеси $\text{NaCl}+\text{CsCl}$, в центре которой располагался исследуемый алмаз.

Эксперимент проведен при давлении 5 ГПа при температуре 1400°C . Режим был следующим: подъем давления, нагревание исследуемого образца и после выдержки в течение 10 минут при заданных Р-Т параметрах быстрое охлаждение - закалка. Время закалки составляло 2-3 сек, что обусловлено эффективным водяным охлаждением внутренней ступени пуансонов аппарата БАРС. Давление определяли по кривой, выражающей зависимость давления в ЯВД от внешнего давления на многопуансонный блок аппарата БАРС. В качестве реперов для калибровки ячейки использовались PbSe и Bi . Температуру в ЯВД измеряли с помощью платиново-родиевой термопары. Погрешность определения давления в опытах оцениваем в ± 0.25 ГПа, температуры в $\pm 25^\circ\text{C}$. Детали экспериментальной методики изложены в [11]. После экспериментов кристаллы алмаза из образца извлекали растворением смеси $\text{NaCl}+\text{CsCl}$ в дистиллированной воде. Алмазы изучали на оптических микроскопах МБС-10 и MS2-Zoom.

После эксперимента алмаз сохранился (Рис. 2). Появления графита на поверхности кристалла не обнаружено, что в первую очередь означает, что эксперимент проводился в поле устойчивости алмаза. Цвет алмаза не изменился. Образования сколов на краях

пластины, а также трещин в объеме кристалла алмаза не наблюдалось. Чаще всего трещины в пластинах алмаза после отжига возникают в центральной зоне, когда кристалл пересекает одна или две крупные трещины. В изученном алмазе мы такого не наблюдали, а это в свою очередь указывает на то, что в алмазе не возникли избыточные напряжения. Причиной этого мы считаем смесь $\text{NaCl}+\text{CsCl}$, в которой находился алмаз в ходе опыта. Смесь данных солей при Р-Т параметрах эксперимента представляла собой пластичную среду, в которой прикладываемое внешнее высокое давление равномерно передавалось на алмаз. Смесь $\text{NaCl}+\text{CsCl}$ при условиях опыта не представляла собой расплав, т.к. алмаз остался в исходном положении в образце; в случае плавления смеси этих солей алмаз должен был бы всплыть вверх образца, чего мы не наблюдали. Химического взаимодействия между алмазом и солями в данной системе не происходило, потому что мы обнаружили потери веса алмаза или формирования каких-либо поверхностных структур травления.

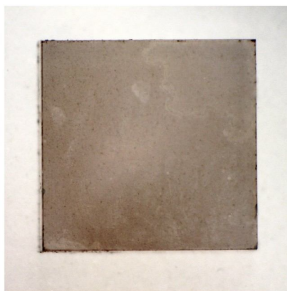


Рис. 2. Пластина из алмаза после эксперимента.

В проведенном исследовании было продемонстрировано, что при давлении 5 ГПа при температуре 1400°C можно проводить отжиг монокристаллов алмаза в форме пластин без потери качества последних. Наиболее часто используемые варианты запрессовки алмаза непосредственно в тугоплавкие оксиды в большинстве случаев не дают такого результата, что приводит к необходимости дополнительных процедур по отбору и шлифовке образцов. Кроме того, применение такой схемы, когда алмаз помещается для отжига в смесь солей, позволит проводить отжиг образцов таких хрупких алмазных материалов, как например, алмазы, выращенные из газовой фазы (CVD-алмазы). Таким образом, можно сделать вывод, что использование смеси солей $\text{NaCl}+\text{CsCl}$ является эффективным

решением одной из важных проблем в технологии отжига алмазных материалов.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИГМ СО РАН №0330-2016-0012.

Литература

- [1] Field E.J. The properties of natural and synthetic diamonds. London: Academic Press, 1992, 350p.
- [2] Орлов Ю.М. Минералогия алмаза. М.: Наука, 1984. 264 с.
- [3] D'Haenens-Johansson U.F.S., Katrusha A., Moe K.S., Johnson P., Wang W. Large Colorless HPHT Synthetic Diamonds from New Diamond Technology. *Gems & Gemology*, 2015, V. 51. P. 3.
- [4] Kaiser W., Bond W. Nitrogen, A Major Impurity in Common Type I Diamond. *Physical Review*, 1959, V. 115, P. 857.
- [5] Zaitsev A.M. Optical Properties of Diamond: A Data Handbook. Springer, 2001.
- [6] Collins A.T. The detection of colour-enhanced and synthetic gem diamonds by optical spectroscopy. *Diamond and Related Materials*, 2003, V. 12, № 10-11, P. 1976-1983.
- [7] Dobrinets I.A., Vins V.G., Zaitsev A.M. HPHT-Treated diamonds: diamonds forever. Springer, 2013.
- [8] Lieberman R.C. Multi-anvil, high pressure apparatus: a half century of development and progress. *High pressure research*, 2011, V. 31, P. 493-532.
- [9] Чепуров А.А. Реакционная ячейка многопуансонного аппарата для отжига алмазов. Патент РФ на полезную модель № 54045. Зарегистрирован в Гос. реестре изобретений РФ 10 июня 2006.
- [10] Malinovsky I.Y., Shurin Ya.I., Ran E.N., Godovikov A.A., Kalinin A.A., Doroshev A.M. A New Type of "Split Sphere" Apparatus. DELP International Symposium-Second Japan-USSR Symposium, Misasa, Japan, 1989.
- [11] Tomilenko A.A., Chepurov A.I., Sonin V.M., Bul'bak T.A., Zhimulev E.I., Chepurov A.A., Timina T.Yu., Pokhilenko N.P. The synthesis of methane and heavier hydrocarbons in the system graphite-iron-serpentine at 2 and 4 GPa and 1200°C. *High Temperatures-High Pressures*, 2015, V. 44, № 6, P. 451-465.

ОПТИМИЗАЦИЯ ВНУТРЕННЕГО ОБЪЕМА ЯВД ПРИ РОСТЕ АЛМАЗА В СИСТЕМЕ Fe-C-S

Карпович З.А.^{1,2} Жимулев Е.И.²

¹НГТУ. Новосибирск

²ИГМ СО РАН им В.С. Соболева. Новосибирск

E-mail: zarpovich@yandex.ru

Алмаз - исключительный минерал с уникальными физическими свойствами, такими как твердость, химическая стойкость, высокая теплопроводность и др., что определяет обширный спектр его технических приложений. Успешный синтез искусственного алмаза в середине XX века привел к стремительному развитию индустрии производства искусственных алмазов. В настоящее время объем синтеза алмаза достигает порядка 1000 тонн [1], и области использования алмазного сырья в технических приложениях постоянно расширяются. Промышленности требуются алмазы с заданными свойствами, повышающими эффективность их применения в электронике, разного рода оптических приложениях и других высокотехнологических областях экономики. Для получения алмаза с новыми физическими характеристиками требуется постоянное совершенствование имеющихся технологий роста кристаллов, разработка новых методик.

Одним из наиболее эффективных методов выращивания крупных кристаллов синтетического алмаза является метод температурного градиента (НРНТ технология) [2]. При использовании данной методики работы для улучшения свойств алмаза ведутся по следующим направлениям: оптимизация составов расплава металла-катализатора, исследование структуры алмаза на предмет вхождения в него металла-катализатора и азота, изучение дефектов, улучшение измерительной и нагревательной системы.

Одной из важных задач при росте алмаза является совершенствование технологии получения безазотных кристаллов типа Па по физической классификации [3]. Для того чтобы минимизировать количество азота в ростовом объеме, в систему металл-катализатор – углерод вводят специальные поглотители азота – геттеры. В роли геттера обычно выступают Al, Ti, Zr, Hf [4, 5]. Наиболее распространенные геттеры – это Al, Ti. С другой стороны, возможности влиять на содержание азота в кристаллах другими активными химическими элементами до конца не изучены. Есть данные об использовании Zn в качестве геттера азота [6]. Введение 1-

10 мас. % Zn в систему Fe-C позволило кристаллизовать бесцветные алмазы. В работе [7] приведены данные о получении алмаза с низким содержанием азота в системе Fe-S-C с введением в систему элементарной серы в количестве 5 мас.% при P-5.5 ГПа и T- 1350°C. Нами продолжены исследования влияния небольшого количества серы (первые проценты) в системе Fe-C на содержание азота в алмазе. В настоящих тезисах рассматривается один из способов улучшения ростовой ячейки высокого давления (ЯВД), разработанный нами для проведения таких экспериментов.

Эксперименты по выращиванию алмазов проводили на аппарате высокого давления типа «разрезная сфера» [8]. В предыдущих исследованиях использовали следующую схему сборки ячейки высокого давления: сам контейнер (ЯВД) изготовлен из смеси тугоплавких оксидов ZrO_2 и CaO (рис.1). Реакционный объем в ЯВД представляет собой ампулу, состоящую из втулки (MgO) с верхней запирающей таблеткой (ZrO_2 и CaO), источника углерода (графит марки МГ ОСЧ), металла-катализатора (железо - карбонильное). Между источником углерода и металлом катализатором устанавливалась спрессованная таблетка из элементарной серы. Снизу втулка запиралась подложкой (ZrO_2 и CaO) с установленным в неё кристаллом алмаза, экранированным платиной. Между тем специфика сборки ЯВД требует минимизации в рабочем объеме разнообразных высокопористых деталей, иначе при наборе давления требуется прилагать большое внешнее усилие для достижения рабочих параметров эксперимента.

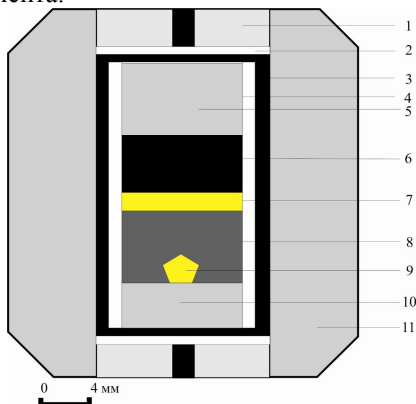


Рис.1. Принципиальная схема сборки ячейки высокого давления (ЯВД).

1 - Торцевая таблетка с молибденовым токовводом; 2 - Молибденовый диск; 3 - Графитовый трубчатый нагреватель с графитовыми крышками; 4 - Втулка из оксида магния; 5 - Верхняя запирающая таблетка; 6 - Источник углерода; 7 - Элементарная сера; 8 - Металл-катализатор; 9 - Растущий кристалл алмаза; 10 - подожка с затравкой алмаза; 11 - Контейнер из оксида циркония.

Нами был предложен более рациональный способ заполнения внутреннего объема, основанный на следующих факторах: способности графита адсорбировать некоторое количество других веществ и низкой температуре плавления элементарной серы (~113°C). Были проведены исследования и определено количество серы, которое может поглотить источник углерода. На предварительно взвешенный источник углерода (таблетка графита марки МГ ОСЧ) помещали навеску серы (ОСЧ), затем данные образцы нагревали до плавления серы. После охлаждения образца избыточную серу счищали и затем источник углерода снова взвешивали. В результате было установлено, что наши стандартные источники углерода, применяемые в ЯВД могут поглощать до 14% серы от своей массы (табл.1).

Таблица.1.

Изменение массы источника углерода при пропитке расплавом элементарной серы

Образец №	Исходная масса источника углерода, карат	Масса источника углерода после пропитки серой, карат	Масса серы, поглощенной источником углерода	
			карат	%
1	5.19	6.02	0.83	16
2	5.22	5.975	0.755	14.5
3	3.99	4.545	0.555	13.91
4	3.95	4.495	0.545	13.8
5	2.9	3.305	0.405	14
6	2.91	3.31	0.4	13.75

Таким образом, в результате проведенной работы удалось, во-первых, повысить плотность сборки ЯВД и, во-вторых, увеличить полезный объем ячейки, так как сера теперь полностью аккумулируется на этапе подготовке эксперимента в источнике углерода, что также является положительным фактором в росте кристаллов.

Данное новшество будет использоваться в ростовых экспериментах уже в ближайшее время. *Работа выполнена в рамках государственного задания ИГМ СО РАН №0330-2016-0012.*

Литература

[1] Шумилова Т. Г. Алмаз в природе и промышленном синтезе. Современные достижения и перспективы // Материалы XVI Геологического Съезда РК «Геология и минеральные ресурсы Европейского Северо-Востока России». – Сыктывкар: ИГ Коми НЦ УрО РАН, 2014. – Т. 2. – С. 355–358.

[2] Чепуров А.И., Федоров И.И., Сонин В.М. Экспериментальное моделирование процессов алмазообразования. – Новосибирск СО РАН, 1997. – 196с.

[3] Бокий Г.Б., Безруков Г.Н., Ключев Ю.А., Налетов А.М., Непша В.И. Природные и синтетические алмазы. – М.: Наука, 1986. – 221с.

[4] Strong H.M., Wentorf R.H. Growth of large, high-quality diamond crystals at General Electric // Am. J. Phys. – 1991. – V. 59 (11). – P. 1005-1008.

[5] Sumiya H., Satoh S. High-pressure synthesis of high-purity diamond crystal // Diamond relat. mater. . – 1996. – V.5. – P.1359-1365.

[6] Liu X. B., Ma H. A., Zhang Z. F., Zhao M., Guo W., Hu M. H., Huang G. F., Li Y., Jia X.P. Effects of zink additive on the HPHT synthesis of diamond in Fe-Ni-C and Fe-C systems // Diamond relat. mater. . – 2011. – V.20. – P.468-474.

[7] Жимулев Е.И., Шеин М.А., Похиленко Н.П. Кристаллизация алмаза в системе Fe – S – C // ДАН. – 2013. – Т. 451. – № 1. – С.73-75.

[8] Чепуров А.И., Федоров И.И., Сонин В.М. Экспериментальные исследования образования алмаза при высоких РТ- параметрах // Геол. и геофизика. – 1998. – Т. 39. – № 2. – С. 234-244.

ПОЛУЧЕНИЕ ВЫСОКОПРОЧНЫХ СПЛАВОВ СИСТЕМЫ Ti-Al ПО «ГИДРИДНОЙ ТЕХНОЛОГИИ»

А.А.Белгибаева¹, Р.Ш. Еркасов¹, И.А. Курзина², Н.И. Косова^{2,3},
Ю.А. Абзаев⁴, В.И. Сачков²

¹*Евразийский Национальный университет (г.Астана, Казахстан)*

²*Национальный исследовательский Томский государственный университет (г. Томск, Россия)*

³*Сибирский научно-исследовательский институт сельского хозяйства и торфа – филиал Федерального государственного бюджетного учреждения науки Сибирского федерального научного центра агробиотехнологий Российской академии наук (г. Томск, Россия)*

⁴*Томский Архитектурно-строительный Государственный Университет (г. Томск, Россия)*

Повышение эффективности авиадвигателей и наземных энергетических установок в настоящее время невозможно без внедрения новых конструкционных материалов, например, таких как интерметаллидные сплавы на основе фаз γ -TiAl и α_2 -Ti₃Al (далее γ -TiAl сплавы), обладающих малым удельным весом (3,7-4 г/см³), высокой удельной прочностью, жесткостью, сопротивлением ползучести и жаростойкостью при повышенных температурах (T=600-850°C) [1]. В данном интервале температур интерметаллиды по удельной прочности и удельному модулю упругости превосходят все известные жаропрочные никелевые сплавы. Предполагается, что γ -TiAl сплавы частично заменят жаропрочные никелевые сплавы в газотурбинном двигателе (ГТД), что позволит качественно увеличить соотношение «тяга-вес» летательного устройства и в целом повысить характеристики двигателя [2].

Ключевой проблемой освоения γ -TiAl-сплавов остаются их низкие технологические свойства, прежде всего, низкая пластичность/вязкость разрушения в широком интервале температур и недостаточная механообрабатываемость. Улучшение пластичности может быть обеспечено за счет микро- и макролегирования, а также за счет получения определенной структуры сплава и оптимизации химического состава [3].

В настоящее время в России отсутствуют сплавы этого класса. Повышение пластичности этих сплавов имеет решающее значение для технологических операций, что возможно путем макролегирования этих сплавов редкоземельными металлами (РЗМ) [4]. РЗМ оказывают положительное влияние на структурную стабильность сплавов,

уменьшают их ликвационную неоднородность, предотвращают образование вредных структурных составляющих (ТПУ фазы, μ -фазы и др.). Разностороннее положительное влияние микродобавок РЗМ позволяет совершенствовать существующие сплавы и создать новые сплавы с уникальным сочетанием различных свойств [5].

Целью работы является разработка метода синтеза композиционных сплавов системы Ti-Al, содержащих интерметаллиды, при вариации содержания Ti и Al с добавками редких и редкоземельных металлов. Предложен новый метод получения сложных композиционных материалов системы Ti-Al, позволяющий получать системы заданного состава с термодинамически устойчивыми интерметаллидными фазами системы Ti-Al согласно диаграмме состояния бинарной системы [6]. Получение материалов состоит из трех последовательных стадий: получение гидридов титана и РЗМ (Sc, Y, Dy, Ta, Ho), прессование порошков полученных гидридов и алюминия с последующим отжигом при заданной температуре. Содержание компонентов выбиралось со стехиометрических расчетов (стиль) по фазовой диаграмме системы с учетом эквимоллярности Ti:Al=1:1 для получения интерметаллидных фаз γ -TiAl. За основу сплава принята система Ti-Al с 2 ат.% добавками РЗМ.

Предлагаемая технология позволит вводить редкие и редкоземельные металлы в сплав еще на начальном этапе, путем прессования исходных гидридов металлов. Таким способом можно получать многофазные сплавы, лигатуры и интерметаллидные соединений переходных (редкоземельных) металлов, образующих гидриды и изделий из них, работающих при температурах до 800 °С, в частности лопаток газотурбинных двигателей, клапанов моторов, вентиляторов для горячих газов.

Для получения интерметаллидных сплавов в качестве исходных материалов применяли металлические порошки титана (ПТЭМ-1) и алюминия (АСД-4) дисперсностью 100-150 мкм, а также металлические РЗМ. Навеску металла, образующего гидрид, засыпали в кварцевую лодочку и помещали в проточную печь для отжига в токе водорода, используя генератор водорода QL500. Программированный нагрев проводили до температуры образования соответствующего гидрида. Полученные гидриды соответствующих металлов смешивали с нанодисперсным порошком алюминия (средний размер частиц (115 ± 10) нм, значение удельной поверхности (19 ± 3) м²/г, содержание алюминия – $(80 \pm 0,6)$ ипрессовали при нагрузке 5,3 т/см³. На выходе заготовка представляла собой цилиндр в форме таблетки с насыпной

плотностью в среднем 3 г/см^3 для всех составов. Полученные таким образом заготовки отжигали в вакуумной установке при значении вакуума $5 \cdot 10^{-3}$ в программированном температурном режиме от 830 до 1150 °С в зависимости от состава образца. При нагреве компактированной смеси двух гидридов и металлического порошка Al удаление водорода из компактной шихты при температурах выше температур диссоциации гидридов, но намного ниже температур плавления соответствующих металлов, приводит к образованию прочных, компактных сплавов указанных металлов.

Измерение микротвердости полученных образцов проводилось по методу Виккерса на приборе Микротвердомер ПМТ-3М [7].

Полученные значения микротвердости сплавов разного состава при нагрузке 200 г показаны на рис. 1. На рис. 1 показана также средняя величина микротвердости сплава системы 50Ti50Al (ТА) для сравнения изменения значений микротвердости после микролегирования РЗМ. Видно, что после добавления РЗМ значения микротвердости увеличилось для всех систем АТГ (Ti-Al-Ho), АТД (Ti-Al-Dy), АТС (Ti-Al-Sc), АТИ (Ti-Al-Y), АТТ (Ti-Al-Ta).

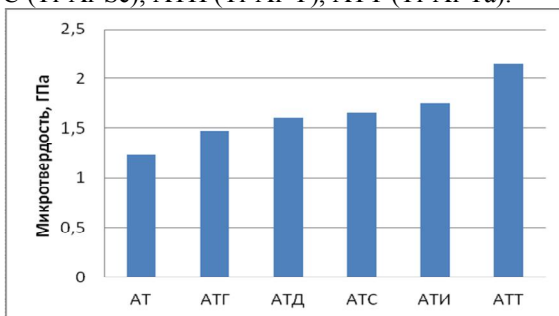


Рис. 1. Зависимость микротвердости сплавов систем АТГ, АТД, АТС, АТИ, АТТ

В результате проведенных исследований определено, что сплавы АТС, АТИ и АТТ имеют большую твердость $H_v = 1,656 \text{ ГПа}$, $H_v = 1,749 \text{ ГПа}$ и $H_v = 2,15 \text{ ГПа}$ соответственно. Согласно литературным данным, Sc, Y, Ta являются перспективными и основными легирующими добавками для алюминиевых сплавов, которые обеспечивают повышение длительных характеристик на 10-50% [8-10]. Вероятно, увеличение твердости этих сплавов обусловлено образованием интерметаллидных фаз, которые вносят вклад в упрочнение в связи с уменьшением среднего размера зерна.

Рентгеноструктурные исследования образцов проводились на ДРОН4 – 07, который был модифицирован к цифровой обработке сигнала. Съёмки производились на медном излучении (Ка) по схеме Брегга - Бретано с шагом 0.020, временем экспозиции в точке 1 сек и в угловом диапазоне 24 – 92°. Напряжение на рентгеновской трубке составляло 30 кВ, ток пучка 25 мА. Идентификацию дифракционных максимумов проводили с помощью кристаллографической базы данных COD [11] в программном комплексе GSAS. На рис. 2 приведены результаты наблюдаемой и расчётной интенсивностей, а также их разность, величина которой ($R_{wp}=9.856$) свидетельствует об удовлетворительной сходимости. Вклады отдельных фаз в расчётную интенсивность оценивались методом Ритвельда.

Рентгенофазовый анализ образцов, полученных при легировании скандием (АТС) показал, что они имеют сложное многофазное строение: идентифицированы исходные компоненты (Ti, Al и Sc) и новые фазы – интерметаллидные фазы TiAl, Ti₃Al, Ti₂Al, Ti₂Al₅, Ti₅Al₁₁, Ti_{1,5}Al_{2,5} (рис.2).

На рентгенограмме чётко фиксируются пики интерметаллидных фаз TiAl и Ti₃Al. Особенностью наличия в структуре интерметаллических фаз титана с алюминием Ti₃Al и TiAl [12] является их прочность при умеренных до (900 - 950°C) температурах и, тем самым, обеспечивающим им жаропрочность, но хрупких в нормальных условиях. Весовая доля фаз TiAl и Ti₃Al составляет наибольшую часть состава полученного композиционного материала, 41,5% и 26,2% соответственно.

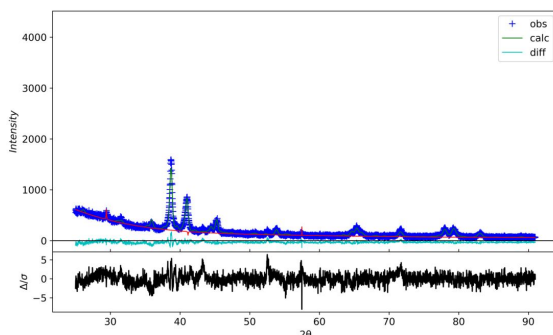


Рис. 2. Дифрактограмма полученного металлического композиционного материала АТС

В образце АТС идентифицированы следующие интерметаллидные фазы: 41,5% алюминид титана состава TiAl

тетрагональной сингонии (пространственная группа $P4/mmm$) с параметрами решетки $a = b = 2.8295$ нм, $c = 4.0696$ нм и размером ОКР (33 ± 5) нм; 26,2% фазы Ti_3Al , имеющая объемно-центрированную решетку тетрагональной сингонии с параметрами $a = b = 5.7619$ нм, $c = 4.6497$ нм, пространственная группа $P63/mmc$ и размером ОКР (134 ± 5) нм; 10,9% фазы $Ti_{1,5}Al_{2,5}$ (пространственная группа P/mmm) с параметрами решетки $a = 4.1083$ нм, $b = 4.0005$ нм, $c = 3.9522$ нм, размером ОКР (65 ± 5) нм. Наименьшую долю составляют 4,5% Ti_2Al_5 (пространственная группа $P4/mmm$) с параметрами $a = b = 3.8331$ нм, $c = 29.2450$ нм, размер ОКР (430 ± 5) нм; 3,7% Ti_5Al_{11} (пространственная группа P/mmm) с параметрами решетки $a = b = 3.9096$ нм, $c = 17.3119$ нм, размер ОКР (265 ± 5) нм; 2,7% фазы $TiAl_2$ (пространственная группа C/mmm) с параметрами решетки $a = 8.8929$ нм, $b = 4.1529$ нм, $c = 4.6380$ нм, размер ОКР порядка (171 ± 5) нм.

Фаза α -Ti (твердый раствор алюминия в титане) имеет примитивную решетку гексагональной сингонии с параметрами $a = b = 2.9278$ нм, $c = 4,6006$ нм, пространственная группа $P63/mmc$, весовая доля 2,4%. Размер ОКР составляет (31 ± 5) нм. Фаза β -Ti (существует при температурах выше $882^\circ C$) с параметрами решетки $a = b = c = 3.3687$ нм, пространственная группа $I m-3m$, весовая доля 1,4%. Размер ОКР составляет (38 ± 5) нм. Также в образцах присутствуют 1,7% фазы Al_3C с параметрами решетки $a = b = c = 3.8818$ нм, пространственная группа $Fm-3m$, размер ОКР (59 ± 5) нм и 1,8% фазы Sc тетрагональной сингонии с параметрами $a = b = 4.7092$ нм, $c = 3.1032$ нм, пространственная группа $P4/nmm$ и размером ОКР (69 ± 5) нм. В качестве дисперсной фазы применяется Sc и он упрочняет структуру сплава путем введения в металлическую матрицу второй фазы в виде тугоплавкого металла. Между тем, практический интерес представляет изучение возможности повышения высокотемпературной матрицы, содержащей дисперсные фазы, непосредственно в спеченном состоянии. Это позволит не только расширить области применения этих материалов, но и изготавливать изделия из них более простыми традиционными методами порошковой металлургии (прессованием и спеканием).

Таким образом, предложен новый метод получения материалов на основе системы Ti-Al-PЗМ. Результаты рентгеноспектрального анализа позволили доказать получение в γ -TiAl сплаве трехфазной структуры с интерметаллидными фазами $TiAl$, Ti_3Al и $TiAl_2$. Из результатов микротвердости и рентгенофазового анализа установлено увеличение твердости сплавов и формирование термодинамически

стабильных интерметаллидных фаз составов Ti_3Al , $TiAl$, $TiAl_2$. Присутствие в образцах фаз Ti_3Al и $TiAl$ связано с термодинамикой процесса фазообразования. Формирование данных фаз характеризуется минимумом стандартной энергии Гиббса образования [13]. Согласно анализу РФА-спектров, большинство полученных фаз имеют ОКР до 100 нм. Данный факт показывает, что выбранным методом можно получать сложные полуфункциональные металлические композиции, содержащие дисперсные интерметаллидные фазы системы $Ti-Al$.

Работа выполнена при поддержке Программы повышения конкурентоспособности ТГУ.

Список литературы:

1. Dimiduk D.M. Material Science and Engineering 1999. V. A 263. P. 281-288.
2. Appel F., Ohring M., Paul J.D.H., and Lorenz U. In Proceedings of the 2nd International Symposium «Structural Intermetallics», eds. Hemker K.J. et al., the Minerals, Metals & Mater. Soc. 2001. P. 63-72.
3. Иванов И.В., Ясинский К.К. Эффективность применения жаропрочных сплавов на основе интерметаллидов Ti_3Al и $TiAl$ для работы при температурах 600-800 °С в авиакосмической технике // Технология легких сплавов, 1996. №3. с. 7-11.
4. Хорев А.И. Фундаментальные и прикладные работы по конструкционным титановым сплавам и перспективные направления их развития // Труды ВИАМ, 2013 г. №2. с. 7-19.
5. Каблов Е.Н. Редкие металлы и редкоземельные элементы – материалы современных и будущих высоких технологий // Труды ВИАМ, 2013. №2. с. 3-18.
6. Казанцева Л.А., Курзина И.А., Косова Н.И., Сачков В.И. и др. Синтез гидридов титана и получение сплавов на их основе // Вестник Томского государственного университета. Химия. 2015. № 2. с. 69–75.
7. Боярская Ю.С. Деформирование кристаллов при испытаниях на микротвердость. Кишинев: Штиинца, 1972. 235 с.
8. Оглодков М.С., Хохлатова Л.Б., Колобнев Н.И. и др. Влияние термомеханической обработки на свойства и структуру сплава системы $Al-Cu-Mg-Li-Zn$ //Авиационные материалы и технологии. 2010. №4. с. 7-12.
9. Ключкова Ю.Ю., Грушко О.Е., Ланцова Л.П. и др. Освоение в промышленном производстве полуфабрикатов из перспективного алюминийлитиевого сплава В-1469 //Авиационные материалы и технологии. 2011. №1. с. 8-12.

10. Ри Хосен, Ри Э.Х., Химухин С.Н., Калугин М.Е. Влияние температурных режимов плавки и легирования сплавов алюминия на свойства отливок // Литейное производство. 2010. №8. с. 7-8.

11. <http://www.crystallography.net/cod>

12. V. Imayev, T. Oleneva, R. Imayev, H.-J. Christ, H.-J. Fecht // Intermetallics 2012. V. 26. P. 91.

13. Курзина И.А. Градиентные поверхностные слои на основе наноразмерных металлических частиц: синтез, структура, свойства: дис. ... д-ра физ.-мат. наук. Барнаул, 2011. 402 с.

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРНЫХ РЕЖИМОВ НАНЕСЕНИЯ ЛАКОКРАСОЧНЫХ ПОКРЫТИЙ НА ЭФФЕКТ ДИСПЕРСИОННОГО ТВЕРДЕНИЯ БЕЗ ЗАКАЛКИ ЛИТЫХ ИЗДЕЛИЙ ИЗ ЭВТЕКТИЧЕСКОГО СИЛУМИНА

*Т.А. Богданова¹, Г.А. Меркулова¹, Я.С. Чефанова¹, М.В. Вааг²,
А.Ю. Богданов¹*

¹ *Сибирский федеральный университет, г. Красноярск*

² *ООО «КиК», г. Красноярск*

**Email, gam1602@mail.ru*

Аннотация. В работе исследован эффект дисперсионного твердения отливок из эвтектического силумина. Проведен анализ влияния температурных режимов нанесения покрытий на механические свойства отливок.

Ключевые слова: силумин, отливка, покрытия, механические свойства, дисперсионное твердение.

В настоящее время алюминиевые сплавы – силумины широко применяют в промышленности. Наиболее распространенным методом получения отливок является метод литья под низким давлением. При литье под низким давлением в постоянные металлические формы скорость кристаллизации сплава настолько велика, что уже в литом состоянии легирующие компоненты могут переходить в твёрдый раствор, тем самым способствуя проявлению эффекта «упрощенного» старения или старения без закалки [1-2]. Необходимо учитывать различную степень пересыщения твердого раствора в зонах отливки различной толщины.

Одной из технологических операций при изготовлении изделий из эвтектического силумина является операция нанесения

лакокрасочных покрытий на готовые изделия. В данной работе исследовано влияние температурных параметров нанесения лакокрасочных покрытий на механические свойства отливок из эвтектического силумина. Реализован эффект «упрощенного» старения для эвтектического силумина марки АК12, исключающий длительный нагрев перед закалкой. Совмещены технологические операции дисперсионного твердения и нанесения лакокрасочных покрытий на готовые изделия, изготовленные методом литья под низким давлением.

Изучены механические свойства образцов изделий, полученных методом литья под низким давлением, после нанесения покрытия по двум режимам: 1) нагрев при 200 °С с выдержкой в течение 60-ти минут (режим 1); 2) нагрев при 220 °С с выдержкой в течение 60-ти минут (режим 2). Анализ результатов испытаний уровня механических свойств проводили на образцах, вырезанных из трех зон изделия с различной толщиной сечения: 10, 20 и 30 мм. Сравнивали свойства исходных образцов, не подвергшихся нагреву и образцов, прошедших воздействие указанных температур в течение 60 минут.

Полученные результаты представлены в таблице и на рисунке.

Установлено влияние режимов нанесения лакокрасочных покрытий на эффект дисперсионного твердения без закалки литых изделий из эвтектического силумина. Выяснено, что происходит увеличение временного сопротивления разрыву на 8,7 % для образцов, прошедших нагрев при 200 °С с выдержкой 60 минут; на 10,4 % для образцов, прошедших нагрев при 220 °С по сравнению с исходными образцами, не подвергавшимися нагреву (см. таблицу). Увеличение твердости после нанесения покрытия составляет 3,6 % и 5,5 % соответственно (см. рис.).

Таблица.

Механические свойства образцов из сплава АК12 до и после нанесения покрытия по двум режимам

Зона толщины, мм	Исходный образец			Режим 1			Режим 2		
	$\sigma_{0,2}$, МПа	σ_B , МПа	δ , %	$\sigma_{0,2}$, МПа	σ_B , МПа	δ , %	$\sigma_{0,2}$, МПа	σ_B , МПа	δ , %
10	98	187	11,9	107	194	9,8	109	198	10,5
20	99	173	7,0	108	188	7,5	111	191	7,7
30	106	188	11,5	-	-	-	-	-	-

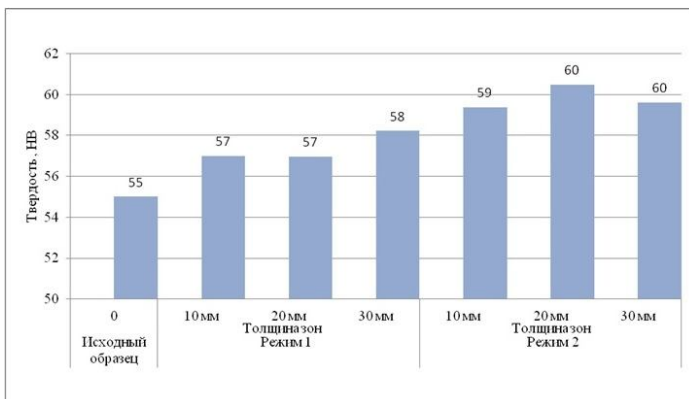


Рисунок. Влияние режимов нанесения покрытия на твердость отливки

Таким образом, при проектировании изделий из эвтектических силуминов, изготавливаемых методом литья под низким давлением, необходимо учитывать эффект дисперсионного старения, реализуемого в условиях операции нанесения лакокрасочных покрытий на поверхность.

Литература

1. Алюминиевые сплавы: свойства, обработка, применение [Текст]: [справочник] / отв. ред. Х. Нильсен и др. ; пер. с нем.; 13-е изд., перераб. и доп. под ред. М. Е. Дрица, Л. Х. Райтбарга. - Москва : Металлургия, 1979. - 678 с.
2. Белов Н.А. Эвтектические сплавы на основе алюминия: новые системы легирования. / Н.А. Белов, Е.А. Наумова, Т.К. Акопян .- Москва: Издательский дом «Руда и Металлы», 2016. – 256 с.

СТАЛЬ ГАДФИЛЬДА - МАТЕРИАЛ С ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИМИ СВОЙСТВАМИ

Фадеев Т.В., Гирн А.В., Лесков М.Б., Квеглис Л.И.
Сибирский Государственный Университет г. Красноярск
E-mail: timur.fadeev.96@mail.ru

Актуальность.

Сталь Гадфильда обладает термоэлектрическими свойствами [1]. В данной работе исследуются условия использования Fe86Mn13C в качестве альтернативного материала термоэлектрическим полупроводникам. Например, в космических аппаратах используются

два типа приборов, преобразующих тепло в электроэнергию: статические и динамические. В основе статических термоэлектродгенераторов обычно лежит радиоактивный источник. В динамических термоэлектродгенераторах, активно внедряемых в спутниковых системах GPS, используют щелочные электрохимические ячейки [2].

Список веществ, имеющих термоэлектрические свойства, достаточно велик, но лишь немногие из них могут использоваться для преобразования тепловой энергии в электрическую.

Полупроводниковые материалы имеют следующие недостатки:

- Низкий КПД (до 18%)
- Сложная, дорогостоящая технология
- Цена (от 300 до 600 и выше \$/кг)
- Токсичность
- При космическом облучении теряет свои свойства

Структурно-теоретическое обоснование.

Нами предложено использование, в качестве термоэлектрического материала, стали Fe86Mn13C (Сталь Гадфильда), благодаря ее полупроводниковым свойствам, установленным в [3-5].

Эффект Нернста-Эттингсгаузена.

Поперечный эффект Нернста-Эттингсгаузена - термомагнитный эффект, наблюдаемый при помещении полупроводника, в котором имеется градиент температуры, в магнитное поле [8].

Суть эффекта состоит в том, что в полупроводнике появляется электрическое поле E_y , перпендикулярное к вектору градиента температур ∇T и вектору магнитной индукции B_z , то есть в направлении вектора $\nabla T \times B_z$. Если градиент температуры направлен вдоль оси Ox , а магнитная индукция — вдоль Oz , то электрическое поле параллельно вдоль оси Oy . Поэтому между точками A и B возникает разность электрических потенциалов. Величину напряжённости электрического поля можно выразить формулой:

$$E_y = \frac{u}{d} = Q_{\perp} B_z \frac{dT}{dx},$$

где $Q_{\perp}$ - постоянная Нернста-Эттингсгаузена, которая зависит от свойств полупроводника и может принимать как положительные, так и отрицательные значения. Значение постоянной $Q_{\perp}$, а, следовательно, и E_y , сильно зависят от температуры образца и от магнитного поля, и при изменении этих величин могут даже изменять знак [9].

Поперечный эффект Нернста-Эттингсгаузена возникает в результате отклонения потока заряженных частиц силой Лоренца. [10].

Знак $\mathcal{Q}_\perp$ не зависит от знака носителей заряда. Действительно, при дрейфе в электрическом поле изменение знака заряда приводит к изменению направления дрейфа. В данном же случае поток диффузии всегда направлен от нагретого конца образца к холодному, независимо от знака заряда частиц. Поэтому направления силы Лоренца для положительных и отрицательных частиц взаимно противоположны, однако, направление потоков электрического заряда в обоих случаях одно и то же [11].

Магнитнополевая зависимость аномального эффекта Н-Э подобна магнитнополевой зависимости намагниченности материала.

Если речь идёт о магнитных плёнках, то при выборе геометрии следует учитывать магнитную анизотропию. Магнитное поле должно быть направлено вдоль оси лёгкого намагничивания плёнки. В противном случае для того, чтобы намагнитить плёнку, понадобится магнитное поле $\sim 2-3$ Тл, таких магнитных полей у нас нет, кроме того, это непрактично. Если плёнка далека от намагниченности насыщения, то и величина аномального эффекта Н-Э будет очень небольшая.

Рассматриваются два варианта расположения оси лёгкого намагничивания:

- перпендикулярно плоскости плёнки;
- в плоскости плёнки.

В зависимости от этого есть два варианта выбора геометрии измерений: расположения градиента температур, магнитного поля и контактов, между которыми измеряется напряжение.

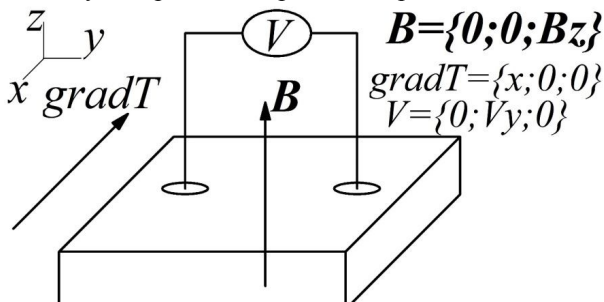


Рис.1 - Ось лёгкого намагничивания лежит перпендикулярно плоскости плёнки.

В этом случае магнитное поле направлено перпендикулярно плоскости, а градиент температур направлен вдоль плоскости – между торцами стеклянной подложки.

Электрическое напряжение измеряется в направлении перпендикулярном градиенту температур и магнитному полю.

Эта геометрия наиболее удобна, т.к. между торцами стекла легко создать большую разность температур.

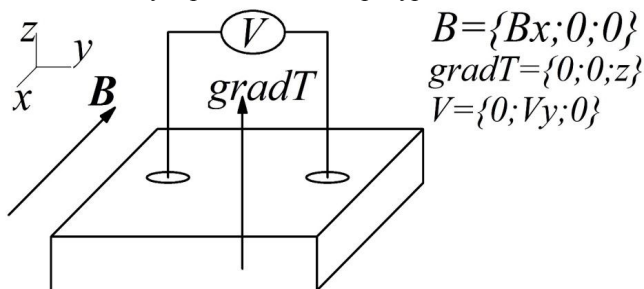


Рис.2 - Ось лёгкого намагничивания лежит в плоскости плёнки.

В этом случае магнитное поле направлено вдоль плоскости, а градиент температур направлен перпендикулярно. Напряжение измеряется с тех же точек (снова перпендикулярно и градиенту температур, и магнитному полю).

В такой геометрии нужно задать градиент температур между верхом и низом плёнки (т.е. на расстоянии всего 1 мкм). Создать такой большой градиент на таком маленьком расстоянии чрезвычайно сложно.

Цель исследования.

Поиск условий, при которых может быть достигнуто изменение величины термоЭДС в пленочных образцах стали Гадфильда.

Оборудование.

Стандартное оборудование Нижегородского государственного университета им Н.И. Лобачевского лаборатории спиновой и оптической электроники

Измерение плёнок стали Гадфильда.

Исследуемые плёнки притягиваются магнитом, что свидетельствует о наличии у них магнитных свойств. При этом ось лёгкого намагничивания лежит в плоскости. Поэтому, если использовать геометрию (рис 1), то не удаётся намагнитить плёнку стали.

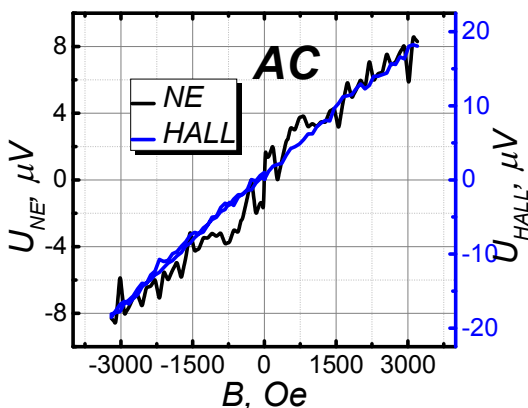


Рис. 3 - График измерений напряжения Н-Э от магнитного поля в геометрии (рис. 1) (т.е. перпендикулярно оси лёгкого намагничивания).

Зависимость ЭДС Холла (синяя) и напряжения Нернста-Эттингсгаузена (чёрный) для плёнки стали Гадфильда (АС).

Видно, что магнитнополевые зависимости как ЭДС Холла, так и напряжения Н-Э линейные, а величина напряжения Н-Э очень небольшая. ЭДС Холла пропорциональна намагниченности.

При измерениях в геометрии (рис. 2) получилось создать совсем небольшую разность температур между верхом и низом плёнки. Поскольку сигнал Н-Э пропорционален разности температур, то и измеряемое напряжение Н-Э тоже было очень маленьким – ниже уровня шума.

Вывод

- магнитнополевая зависимость намагниченности не имеет петли гистерезиса, т.к. магнитная анизотропия сразу же разворачивает магнитный момент в плоскости плёнок после снятия магнитного поля.

- в наших полях намагниченность плёнки далека от намагниченности насыщения, т.е. мы находимся на начальном участке кривой намагничивания, что и обуславливает линейный характер зависимости эффекта Н-Э.

Список источников

1. Kveglis, L.I. Local electron structure and magnetization in b-Fe86Mn13C [Текст] L.I. Kveglis, F.M. Noskov // Superlattices and Microstructures. – 2009, V.46. – P. 114-120.

2. <https://futurist.ru/articles/1272-termoelektrogeneratori-nanosputniki-i-solnechnie-batarei-kak-dobity-energiyu-v-kosmose>.

3. Л.И. Квеглис, Р.Б. Абылкалыкова, А.В. Джес, М.Н. Волочаев, А.Г. Черков. Причина знакопеременного термоэлектрического эффекта в сплаве Fe86Mn13C / Известия Российской Академии наук. Серия физическая. – 2014. Том 78, № 4. - С. 504–507

4. Структура деформированных металлов. Бернштейн М.Л. Металлургия, 1977 г.

5. М.Б. Ригмант, М.К. Корх, Д.И. Давыдов, Д.А. Шишкин, Ю.В. Корх, А.П. Ничипурук, Н.В. Казанцева. Методы выявления мартенсита деформации в аустенитно-ферритных сталях / Российская академия наук. Ежемесячный журнал «Дефектоскопии». – 2015. № 11, - С. 504

6. Abylkalykova R., Dzhes Alex, Kveglis Liudmila, M. Noskov F., Volochaev Mihail, Cherkov Alexandr. (2014). Investigating deformation martensite in thinned samples and films of Fe86Mn13C alloy. Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 78. 330-332.

7. Р. Б. Абылкалыкова, А. В. Джес, Л. И. Квеглис, Ф. М. Носков, М. Н. Волочаев, А. Г. Черков. Исследование мартенсита деформации в утоненных образцах и пленках сплава Fe86Mn13C / Известия РАН. Серия физическая. – 2014. Том 78, № 4. - С. 504–507

8. Блатт Ф. Дж. Теория подвижности электронов в твёрдых телах / Пер. с англ. — М.: Физматлит, 1963. — 224 с.

9. Цидильковский И. М. Термомагнитные явления в полупроводниках. — М.: Физматгиз, 1960. — (Серия «Физика полупроводников и полупроводниковых приборов»). — 396 с.

10. Житинская М. К., Немов С. А., Свечникова Т. Е. Влияние неоднородностей кристаллов Bi_2Te_3 на поперечный эффект Нернста-Эттингсгаузена // Физика и техника полупроводников. — 1997. — Т. 31. — № 4. — с. 441—443.

11. Аскеров Б. М. Кинетические эффекты в полупроводниках. — Л.: Наука, 1970.

12. Термоэлектрические материалы и преобразователи. Под ред. Д. Б. Коровякова. М.: Мир, 1964.

13. Проблемы радиационной безопасности при обращении с радиоизотопными термоэлектрическими генераторами. «Атомная стратегия», СПб, N1(6), июнь 2003. Стр. 32.

14. Поздняков Б. С, Коптелов Е. А. Термоэлектрическая энергетика. М.: Атомиздат, 1974 г., 264 с.

Авторы благодарят за помощь в проведении экспериментов Дорохина Михаила Владимировича, ведущего научного сотрудника Нижегородского государственного университета им Н.И. Лобачевского.

РАСЧЕТНЫЕ ОЦЕНКИ ВОЗМОЖНОСТИ ОМИЧЕСКОГО ПРОБОЯ ГАЗА АРГОН В ТОКАМАКЕ КТМ

Оспанова Ж.Н.^{1,2}, Жаксыбаева А.А.¹, Чектыбаев Б.Ж.¹, Садыков А.Д.¹, Ерболатулы Д.².

¹Институт атомной энергии НЯЦ РК, Курчатов, Казахстан

²Восточно-Казахстанский Государственный университет им.

С. Аманжолова, г. Усть-каменогорск, Казахстан

E-mail: Ospanovazn@gmail.com

На данный момент ведутся работы над вводом в эксплуатацию Казахстанского материаловедческого токамака КТМ. Начальная стадия разряда плазмы включающая пробой, где происходит фазовый переход газ-плазма, а также начало формирования плазменного шнура выделяется в отдельную задачу на этапе физического пуска токамаков. Переход несамостоятельного электрического разряда в самостоятельный происходит в результате скачкообразного нарастания тока, ограничиваемого только балластным сопротивлением в схеме питания. Этот процесс называется пробоем газового промежутка, а соответствующее ему напряжение разряда - напряжением пробоя (или напряжением зажигания разряда). Фаза запуска – пробой газа – определяется большим количеством разнообразных процессов и явлений. Определенные требования и ограничения к условиям пробоя газа вносят конструкционные и особенности токамака КТМ.

Для проведения экспериментов с плазмой, а также поиска начальных данных, с помощью которых можно было бы создавать условия для пробоя плазмы с последующим поднятием ее тока в соответствии с заданным сценарием, были произведены расчеты, по результатам которых можно утверждать об осуществлении пробоя газа (аргон) при исходных условиях. В данной статье приведены расчетные данные старта разряда в момент пробоя в токамаке КТМ. Расчетные оценки проведены на основании эмпирических и полуэмпирических формул. [1-3]

В качестве рабочего газа используется аргон. Пробой и старт разряда инициировался вблизи внутренней стенки вакуумной камеры. Область пробоя имеет сечение окружности, координаты центра области пробоя: $R = 0.7$ м, $z = 0.2$ м, напряжение на обходе $U \sim 5$ В. Тороидальное магнитное поле $B_z = 0.69$ Тл. Напряженность электрического поля в зоне пробоя $E \sim 1.14 \frac{В}{м}$.

На рисунке 1 приведены результаты расчета по формуле эмпирического скейлинга «реализуемости пробоя», где значения поля рассеяния варьируются в диапазоне $B_{str} \sim 3 + 10$ Гс. [1]. График характеризует допустимый уровень полей рассеяния при заданных начальных параметрах ($U = 5$ В, $I = 30$ кА, $R = 0.7$ м). При исходных параметрах для пуска, мы видим, что допустимый уровень рассеянных магнитных полей не должен превышать 7 Гс.

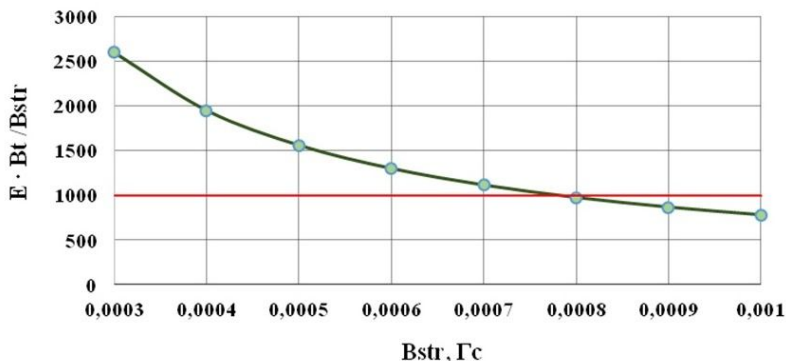


Рис.1. Условие «реализуемости пробоя» по формуле эмпирического скейлинга (красным цветом выделена пороговая линия, значения полей рассеяния ниже которой не допустимы).

В программе Plasmaless TokScen [4], по заданному сценарию токов в обмотках полоидальной системы находится эволюция магнитных полей в вакуумной камере токамака КТМ. На рисунке 2 представлена структура магнитных полей в момент пробоя в вакуумной

камере токамака КТМ, смоделированная в программе Plasmaless TokScen. Как видно из рисунка уровень рассеянных магнитных полей в области пробоя размером около 0.2 м не превышает $B_{str} \sim 4$ Гс, что говорит о «реализуемости пробоя» по формуле эмпирического скейлинга.

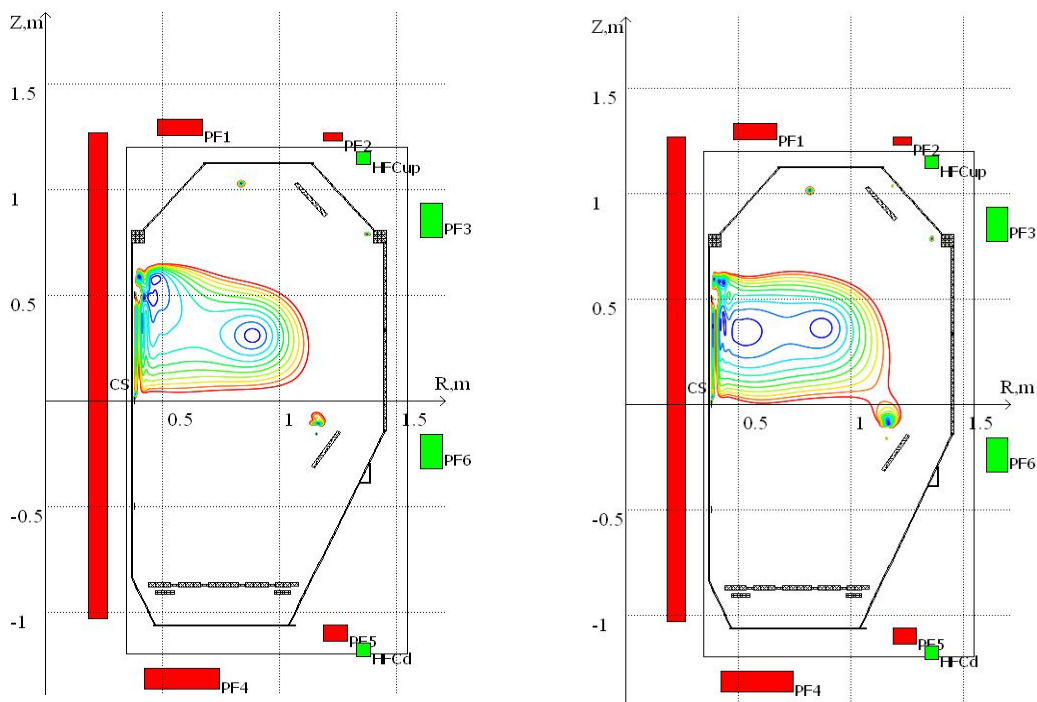


Рис. 2. Структура магнитных полей в момент пробоя в токамаке KTM

Условие пробоя газа в токамаке на основе теории Таусенда:

$$\alpha \cdot L_{eff} > 1 \quad (1)$$

где L_{eff} - характерная длина силовых линий вдоль магнитного поля (от стенки вакуумной камеры через область пробоя до стенки), α - первый коэффициент Таусенда $\alpha = \alpha(p, E)$.

Для определения оптимальных параметров пробоя газа расчеты проводились для широкого диапазона значений: $p = 10^{-5} \div 10^{-4}$ торр, $\alpha = 0.1 \div 0.2$ м.

Эффективная длина силовых линий рассчитана по формуле

$$L_{eff} = C_L \cdot \alpha \cdot \frac{B_t}{B_{str}}, \quad (2)$$

где C_L - подгоночный параметр, a – малый радиус области пробоя.

Из формулы (2) мы можем получить довольно грубую оценку эффективной длины силовых линий. Подгоночный параметр C_L берем равным 0.25, что является оценкой снизу для L_{eff} в токамаке КТМ.

На рисунках 3, 4 представлены результаты расчетов эффективной длины силовых линий и условия реализуемости пробоя газа по теории пробоя Таусенда.

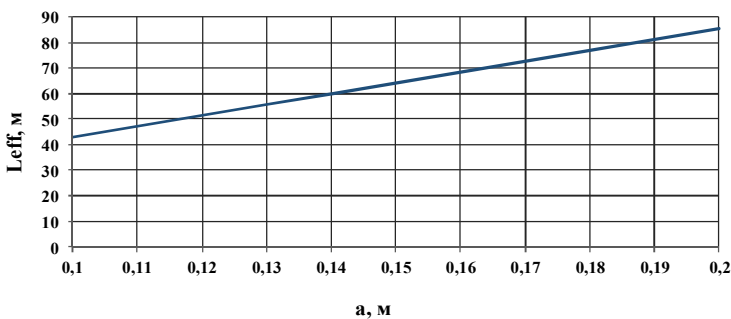


Рис.3. Зависимость эффективной длины силовых линий от радиуса области пробоя ($B_{str} = 4 \text{ Гс}$)

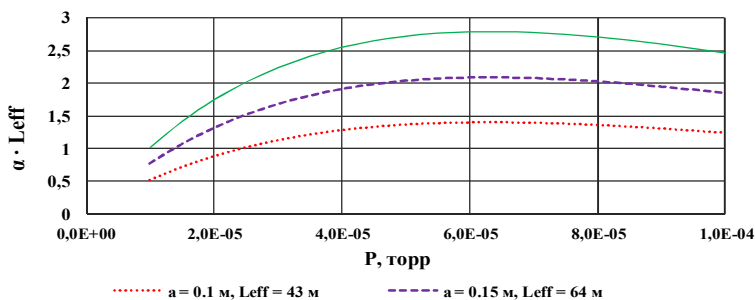


Рис. 4. Зависимость условия реализуемости пробоя газа от давления ($B_{str} = 4 \text{ Гс}$).

По графикам, представленным на рисунках 3, 4 можно говорить о наличии пробоя газа даже при малом радиусе области пробоя в 0.1 м. При этом значение эффективной длины силовых линий равной 43 м (оценка снизу). Рабочая область по давлению: от $2.5 \cdot 10^{-5} \text{ торр}$ до $1 \cdot 10^{-4}$

⁰⁴ торр, при этом наилучшие показатели по условию формулы пробоя достигаются при давлении $6.5 \cdot 10^{-05}$ торр, вне зависимости от величины области пробоя.

Расчетные оценки условий омического пробоя газа (аргон) подтверждаются данными о пусках с физических диагностик токамака КТМ (рис.5).

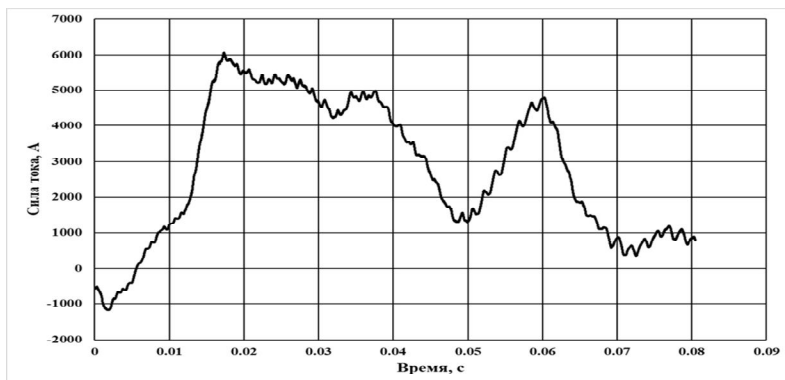


Рис. 5. Величина тока плазмы во время пуска на токамаке КТМ

Список использованной литературы

1. Беляков В.А., Кавин А.А., Лепихов С.А., Минеев А.Б., Овсянников А.Д. Токамак: начальная стадия разряда. – СПб.:«Лань». – 2014. – 180 с.
2. Ткачев А.Н., Феденев А.А., Яковленко С.И. Коэффициент Таунсенда, кривая ухода и эффективность формирования пучка убегающих электронов в аргоне // Журнал технической физики. – 2007. – Т. 77, Вып. 6. – С. 22–27.
3. Lloyd B., Jackson G.L., Taylor T.S., et al., Low voltage ohmic and electron cyclotron heating assisted startup in DIII-D, Nuclear Fusion, 1991, V.31, P. 2031.
4. Садыков А.Д., Скаков М.К., Шаповалов Г.В., Садыкова М.С. Расчетный код моделирования динамики магнитных полей с учетом наведенных вихревых токов в установках типа токамак // Вестник НЯЦ РК – 2015. – №3. – С. 55-58.

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИФфуЗИОННОЙ ЗОНЫ СИСТЕМЫ Ni-Al

Московкина А.К., Рыкова К.С., Злобина Е.С., Муравлев К.А.,
Елькина Е.А.,

Алтайский государственный университет, Барнаул, Россия

E-mail: nastja.mak@yandex.ru

Научный руководитель Макаров С.В.

Введение

В области контакта двух разнородных металлов происходит процесс взаимной диффузии [1,2]. Результатом данного процесса является формирование переходной области – диффузионной зоны [3]. Диффузия – один из важнейших процессов переноса вещества в металлах и сплавах. Она относится к одному из наиболее общих процессов, происходящих в твердых телах, и играет огромную роль во многих превращениях, определяющих структуру и свойства материалов [4].

Диффузионная зона характеризуется неоднородным распределением компонентов системы, вследствие чего происходит диффузионное перемещение атомов, ведущее к установлению во всём объёме образца фазового состава, определяемого диаграммой равновесия [3].

Цель данной работы заключается в исследовании диффузионной зоны на границе раздела системы Ni-Al.

Методика и материалы

Исследование взаимной диффузии проводилось в двухкомпонентной системе, состоящей из чистых металлов - никеля и алюминия. Пластины чистого никеля и алюминия прессовали между собой, а затем помещали их в вакуумную печь, где они подвергались изотермическому отжигу при остаточном давлении 10^{-5} мм.рт.ст. и температуре отжига 700°C со временем выдержки для первого образца – 3 часа, для второго – 6 часов. После постепенного охлаждения образцы разрезали вдоль границы раздела, изготавливали шлифы путём шлифования и полирования. Оптическое исследование диффузионной зоны было проведено на оптическом микроскопе Neohpot-32. Опыты по исследованию микротвёрдости проводились на приборе ПМТ-3М. Фазовый состав и структурное состояние диффузионной зоны исследовалось с использованием рентгеновской дифракции на дифрактометре ДРОН-3.

Экспериментальные результаты

Оптическая микроскопия диффузионной зоны системы Ni-Al для образца №1, спеченного при температуре 700°C и времени выдержки – 3 часа, приведена на рис.1.1. Панорама диффузионной зоны для образца №2, спеченного при температуре 700°C и времени выдержки – 6 часов, приведена на рис.1.2.

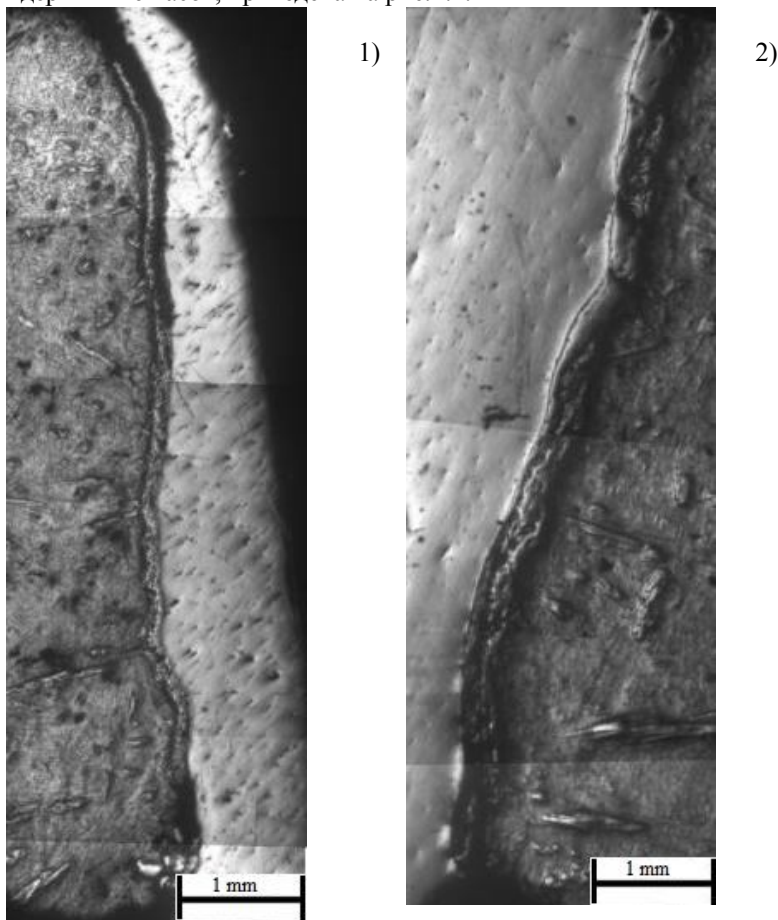


Рис.1. Панорамы диффузионных зон, сформированных при 700°C 1) в системе Ni-Al с выдержкой 3 часа; 2) в системе Ni-Al с выдержкой 6 часов.

Результаты измерения микротвёрдости образца №1 системы Ni-Al, после отжига при температуре 700°C в течении 3 часов, приведены на рис.2.

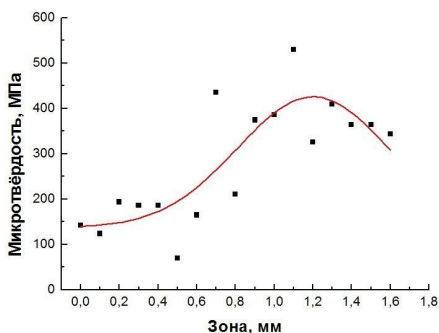


Рис.2. Распределение микротвёрдости по сечению диффузионной зоны в системе Ni-Al, сформированная при отжиге с выдержкой 3 часа.

В интервале 0 - 0,6 мм значения микротвёрдости соответствуют алюминию, в интервале 1-1,6 мм – никелю, а в интервале 0,6 - 1 мм значения микротвёрдости растёт.

На рис. 3 приведены результаты измерения микротвёрдости образца №2 системы Ni-Al, после отжига при температуре 700°C в течении 6 часов.

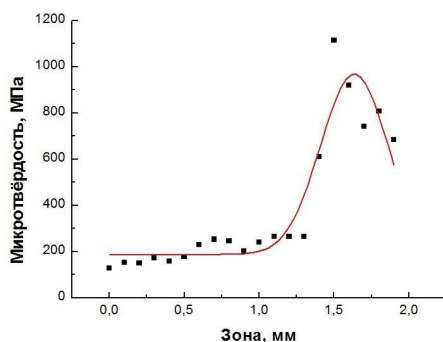


Рис.3. Распределение микротвёрдости по сечению диффузионной зоны в системе Ni-Al, сформированная при отжиге с выдержкой 6 часов.

В интервале 0 - 1,25 мм значения микротвёрдости соответствуют алюминию, в интервале 1,25-1,8 мм – никелю.

Для анализа геометрических параметров диффузионной зоны системы Ni-Al экспериментальные зависимости аппроксимировали функцией Гаусса

$$y = y_0 + \frac{A}{w\sqrt{\pi/2}} e^{-2\frac{(x-x_c)^2}{w^2}}$$

где w – полуширина диффузионной зоны, A – величина микротвёрдости, x – текущее значение ширины диффузионной зоны.

Диффузионные процессы на границе раздела биметалла протекают в условиях термической активации, а также действия градиента концентрации и градиента химического потенциала. В этой связи рассчитать коэффициент диффузии D можно по формуле [5]

$$D = \frac{x^2}{2t}$$

где x – средняя глубина диффузионного слоя (для расчета берется половина глубины диффузионного слоя), t – время диффузионного процесса.

Используя формулу выше рассчитали коэффициенты взаимной диффузии для всех образцов, данные приведены в табл. 1.

Таблица 1.
Коэффициенты взаимной диффузии

Образец	Время отжига, час	Полуширина диффузионной зоны, мм	Коэффициент диффузии, $10^{-8}\text{см}^2/\text{с}$
Ni-Al	3	0,45	9,32
Ni-Al	6	0,78	28,23

На рис. 4 представлена рентгенограмма диффузионной зоны системы Ni-Al для образца №2, спеченного при температуре 700°C и времени выдержки – 6 часов.

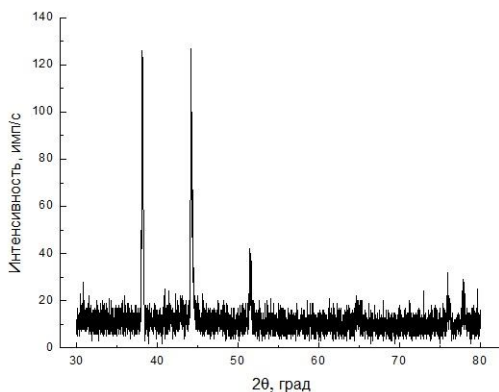


Рис. 4 – Рентгенограмма образца №2 системы Ni-Al, отожжённого при температуре 700⁰С с выдержкой 6 часов.

Система рефлексов идентифицирована как система рефлексов чистого алюминия, чистого никеля и интерметаллической фазы NiAl. Результат расшифровки рентгенограммы, проведенной по известной методике [6], образца №2 системы Ni-Al представлен в табл. 2.

Таблица 2.

Значения межплоскостных расстояний

2θ, градусы	Интенсивность, имп/с	Межплоскостное расстояние, d	Фазы
38,2	123	2,35	Al
44,1	116	2,04	Al
44,2	100	2,05	Ni
51,5	42	1,77	Ni
72,9	24	1,29	NiAl

Рентгенофазовый анализ образца не выявил в структуре материала другой кристаллической фазы кроме алюминия, никеля и интерметаллической фазы NiAl.

Результаты экспериментов по исследованию диффузионной зоны в зависимости от времени выдержки свидетельствуют о процессах диффузии на границе раздела твердая фаза - жидкая фаза. Измеренные геометрические и диффузионные параметры диффузионной зоны на границе раздела «твёрдый никель - жидкий алюминий» при 700⁰С показали, что по мере увеличения времени

выдержки коэффициент диффузии увеличивается. Структура диффузионной зоны неоднородна, со стороны алюминия сформирован заметный слой с высокой прочностью интерметаллических фаз, который, по-видимому, и обеспечивает измеренный диффузионный массоперенос.

Диффузионная зона представляет собой совокупность интерметаллических фаз систем, распределенных с переменной плотностью в макроскопической области в окрестности исходной границы раздела. Рост коэффициента диффузии и рост значений микротвёрдости обусловлены увеличением времени выдержки и, возможно, формированием дополнительных диффузионных каналов – межкристаллитных и межфазных границ. Совокупность интерметаллических фаз и твердых растворов определяет прочностные свойства диффузионной зоны, а, следовательно, и адгезионную прочность биметаллического агрегата.

Библиографический список:

1. Боровский И.Б., Гуров К.П., Марчукова И.Д., Угасте Ю.Э. Процессы взаимной диффузии в сплавах, М.: Наука, 1973, 360 с.
2. Терехов С.В. Взаимная диффузия в конденсированных растворах, ЖТФ, 2007. Т.7. вып.8. С.36-43.
3. Гегузин Я.Е. Диффузионная зона, М.: Наука, 1979, 344 с.
4. Попов А.А., Гриб С.В. Взаимная диффузия в двойных системах, Екатеринбург: ГОУ ВПО УГТУ–УПИ, 2006. 23 с.
5. Алюминиевые сплавы. Металловедение алюминия и его сплавов: справочное руководство. – М., 1971.
6. Гинье А. Рентгенография кристаллов. Теория и практика. — М., 1961.

СТРУКТУРНЫЕ И КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ТОНКИХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНОК (Al, Cu, Zn)

Рыкова К.С. Плотников В.А., Макаров С.В.,
Алтайский государственный университет, Барнаул, Россия
E-mail.ru: rykovaks@mc.asu.ru

Введение

В настоящее время исследование структурного состояния тонких пленок является одной из важных проблем физики твердого тела, связанной с фундаментальными процессами структурообразования и формирования наноструктур.

Создание современных материалов, которые в большинстве случаев являются структурно чувствительными, требует, как на стадии разработки и изучения свойств новых материалов, так и на стадии отработки технологии их получения и изготовления приборов, исследований структуры веществ: микроскопической, рентгенографической, электронографической и других [1].

Цель работы было получение тонких металлических пленок, исследование островковой структуры и кристаллографических особенностей островков.

Материалы и методика экспериментов

В работе по получению пленок использовался метод вакуумной конденсации. Этот метод осуществляется путем подведения к веществу энергии. При температуре, превышающей температуру испарения вещества, частицы покидают испаритель, переносятся в вакууме на холодную подложку и конденсируются на ее поверхности в виде тонкой пленки. С помощью данного метода можно получать пленки металлов любой толщины. Пленки получаются достаточно чистыми, так как процесс проходит в высоком вакууме.

Известно, что формирование островков пленки на аморфной подложке идет через формирование плотно упакованных плоскостей [2]. Поэтому для исследования были выбраны элементы с разными типами кристаллической решетки: алюминий и медь имеют кубическую гранецентрированную решетку, а цинк – гексагональную плотноупакованную. При выполнении работы были получены металлических пленки на аморфной подложке из элементов – алюминия, меди и цинка без примесей. Аморфная подложка изготовлена из силикатного стекла.

Исследование поверхности тонких пленок были проведены на сканирующем зондовом микроскопе SolverNext [2,3].

Результаты исследования

Несмотря на то, что пленки представляют собой зеркальные поверхности, зондовая микроскопия показывает явно выраженную островковую структуру (рис. 1-3), представляющую собой фрагменты, распределенные случайным образом по подложке.

Для анализа структуры был выбран размер 1х1 мкм.

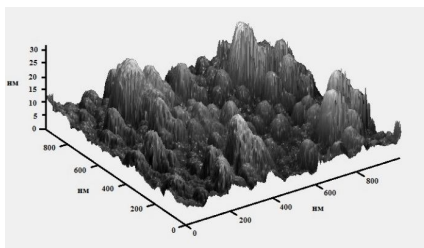


Рис. 1. Островковая структура пленки Al. Размер 1x1 мкм

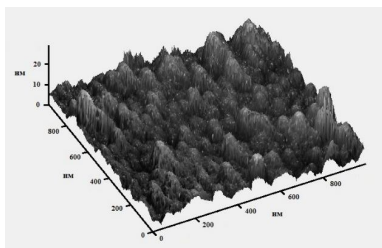


Рис. 2. Островковая структура пленки Cu. Размер 1x1 мкм

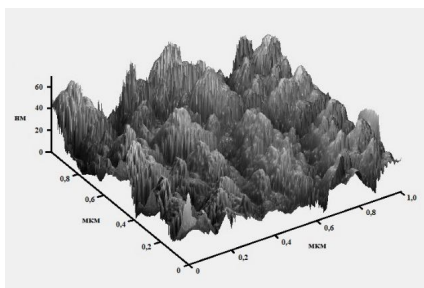


Рис. 3. Островковая структура пленки Zn. Размер 1x1 мкм

Пленка Zn имеет большие области свободного объема, у пленок Al и Cu области имеют меньший объем.

Несмотря на кажущуюся хаотичность, пленки обладают некоторой периодичностью распределения островков.

Получить информацию о структурных свойствах поверхности, в частности о периодичности структуры, позволяет анализ Фурье-спектра.

Фурье-образом прямой кристаллической решетки (прямого пространства) является обратная решетка (обратное пространство, импульсное пространство). Обратная решетка — точечная трехмерная решетка в абстрактном обратном пространстве, где расстояния имеют размерность обратной длины [4].

Функция радиального распределения представляет собой плотность обратных длин, сгруппированных в плоскости X и Y. Эта характеристика эквивалентна распределению частот сложной функции, содержащей гармонические компоненты. Из этого следует, что обратная величина этой частоты эквивалентна длине волны, а в нашем случае это соответствует параметру периодичности островковой

структуры. Это означает, что островки исследуемых металлических пленок распределены по поверхности подложки с некоторой периодичностью [4].

И на Фурье-образе (рис. 4, 6, 8), и на графике функции радиального распределения (5, 7, 9) видно, что эта величина статистическая, существует разброс этих параметров, дисперсия которых может достигать значительной величины.

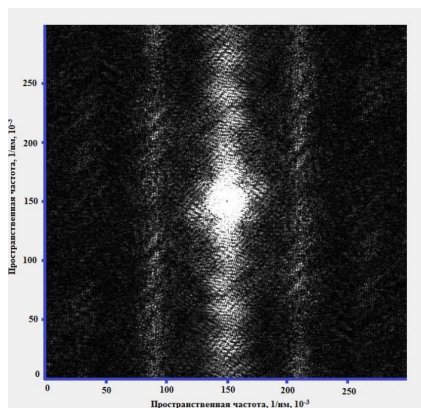


Рис. 4. Фурье-образ островковой структуры тонкой пленки Al

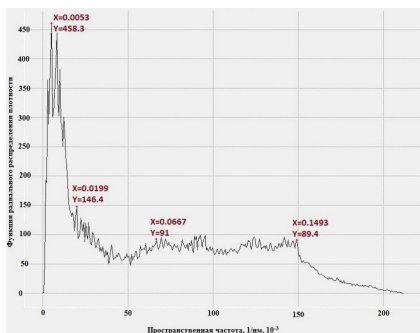


Рис. 5. Функция радиального распределения Фурье-образа пленки Al

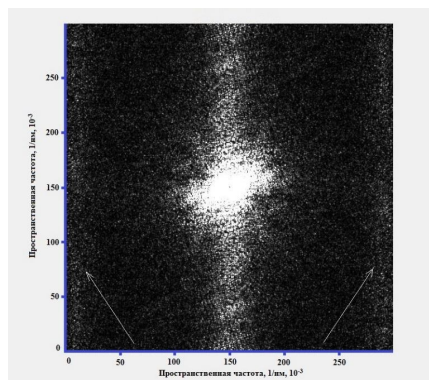


Рис. 6. Фурье-образ островковой структуры тонкой пленки Cu

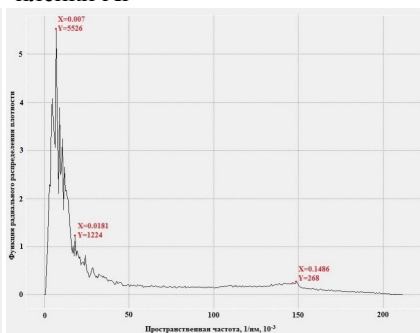


Рис. 7. Функция радиального распределения Фурье-образа пленки Cu

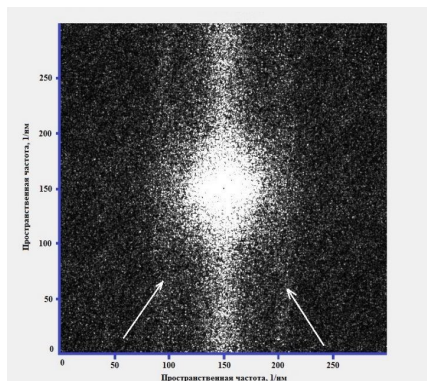


Рис. 8. Фурье-образ островковой структуры тонкой пленки Zn

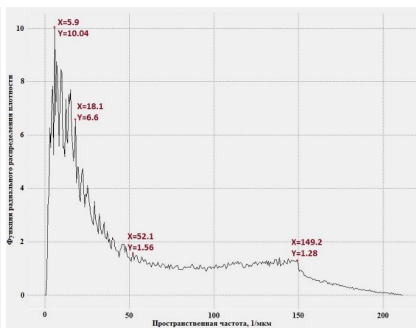


Рис. 9. Функция радиального распределения Фурье-образа пленки Zn

Центральное пятно функции радиального распределения характеризует крупномасштабную периодичность, дополнительные рефлексы – маломасштабную.

В табл. 1 отображены пространственные частоты для каждого максимума и параметр периодичности (обратная к пространственной частоте величина).

Таблица 1.
Пространственные частоты и параметры периодичности основных максимумом

Пленка	Пространственная частота, 10^{-3} 1/нм				Параметр периодичности, нм			
	1	2	3	4	1	2	3	4
Al	5.3	19.9	66.7	149.3	188.7	50.3	15.0	6.7
Cu	7.0	18.1	-	148.6	142.9	55.2	-	6.7
Zn	5.9	18.1	52.1	149.2	169.5	55.2	19.2	6.7

Определение ориентации пленок алюминия, меди и цинка проводили методом рентгеноструктурного анализа на рентгеновском дифрактометре ДРОН-3.

Известно, что формирование островков пленки на аморфной подложке идет через формирование плотно упакованных плоскостей [5]. После сравнения полученных рентгенограммы с эталонными можно идентифицировать индексы основных рефлексов пленки и определить направляющие плоскости: рост пленки происходит в направлении перпендикулярном поверхности подложки. Кристаллы

пленок имеют следующие оси ориентации: алюминий – $[111]$, медь – $[111]$, цинк – $[002]$.

Направляющие плоскости изображены на рис. 10.

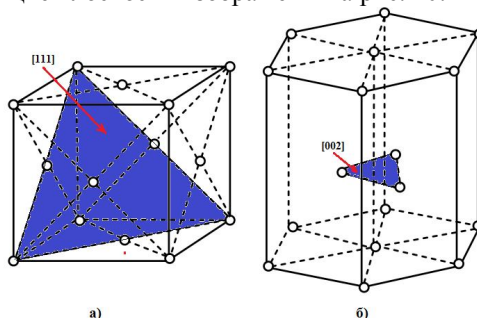


Рис. 10. Кристаллические решетки с выделенными преимущественно отражающими плоскостями: а) алюминия и меди; б) цинка

Результаты расчетов межплоскостных расстояний и табличные значения представлены в табл. 2.

Таблица 2.
Межплоскостные расстояния, рассчитанные по данным рентгенограмм и табличные

Пленка	Межплоскостное расстояние d , Å	Межплоскостное расстояние $d_{\text{табл.}}$, Å
Al	2.3305 ± 0.0153	2.3379
Cu	2.0871 ± 0.0136	2.0984
Zn	2.4735 ± 0.0162	2.4879

Можно сделать вывод, что данные рефлексы ориентированы правильно с учетом неравновесностей тонкопленочных структур.

Закключение

По результатам исследований можно сделать следующие выводы:

1. Характерная особенность металлических пленок на аморфной подложке – островковая структура.
2. Особенностью Фурье-анализа исследуемых пленок является явно выраженная анизотропия Фурье-образов, представляющая собой выделенные направления предпочтительного формирования островковой структуры.
3. У всех исследованных пленок на разных масштабах наблюдается два типа периодичности: центральное пятно функции

радиального распределения характеризует крупномасштабную периодичность, дополнительные рефлексы – маломасштабную.

4. Рентгеноструктурный анализ показал, что осаждение тонкопленочного конденсата преимущественно осуществляется по выделенному кристаллографическому направлению. Ориентационный рост пленок алюминия и меди осуществляется в направлении [111], а рост пленки цинка – в направлении [002].

5. Межплоскостные расстояния, вычисленные из эксперимента, совпадают со справочными данными.

Библиографический список

1. Якутенков А.А. Руководство к лабораторной работе «Рентгенострук-турный анализ тонких пленок» по курсу Физические основы микро- и нанoeлектроники // Казань, 2012.-14 с.

2. Иевлев, В.М., Структурные превращения в тонких пленках / В.М. Иевлев, Л.И. Трусов, В.А. Холмянский // М.: Металлургия, 1988.-326 с.

3. Сканирующий Зондовый Микроскоп СОЛВЕР НЕКСТ. Руководство по эксплуатации.-2013.-285 с.

4. Макрушина, А.Н. Структурно-фазовые состояния тонких интерметаллических пленок системы Cu-Sn // Барнаул, 2017.-141 с.

5. Сиротин, Ю.И. Основы кристаллофизики/ Ю.И. Сиротин, М.П. Шаскольская // -М.: Наука, 1979.-640 с.

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИБИСМАЛЕИНИМИДНОЙ СМОЛЫ

Сушкеева М.И., Насонов А.Д., Бетеньков Ф.М., Олейников А.Н.

Алтайский государственный педагогический университет,

г. Барнаул

E-mail: bfm1982@yandex.ru

Основное достоинство большинства полимерных материалов заключается в сочетании требуемого уровня механических свойств с низкой стоимостью и высокой производительностью при формировании изделий. Механические характеристики полимеров считаются одними из важнейших эксплуатационных показателей в любой области их применения.

Одной из основных проблем современной физики полимеров является установление связи между химическим строением, структурой, составом и физическими свойствами полимерных

материалов, а также аналитическое описание такого рода взаимосвязи. Использование современных высокоточных и информативных методов позволяет более точно определить характерные структурные и молекулярные изменения, происходящие в полимере.

Добавляя в полимер комплексный наполнитель мы попытались изменить физические свойства стеклопластиков в заданном направлении.

В качестве объектов для исследования была взята полибисмалеинимидная смола (ПАИС) где в качестве наполнителей служили стеклопорошок и эмульгированный капролактан (ЭК) [1].

Для проведения исследования были созданы четыре экспериментальных образца полимерных композитов (ПК). Для создания первого ПК были взяты ПАИС и стеклопорошок в соотношении 1:3. Во второй образец, помимо ПАИС и стеклопорошка, взятых в том же соотношении 1:3, был введен эмульгированный капролактан в размере 5% от общего объема вещества. Третий ПК состоял из ПАИС и стекло порошка в соотношении 1:2. При создании четвертого образца использовалось два слоя стеклоткани. Исследования проводились низкочастотным акустическим методом на обратном крутильном маятнике [2-3] в интервале температур от 0 °С до 300 °С с частотой 1 Гц. Из экспериментальных данных рассчитывались: динамический модуль сдвига (G') и тангенс угла механических потерь ($tg\delta$). Погрешность измерения G' составляла 8-10%. Погрешность измерения $tg\delta \approx 10\%$.

Основные результаты измерений приведены на рис. 1 и рис. 2.

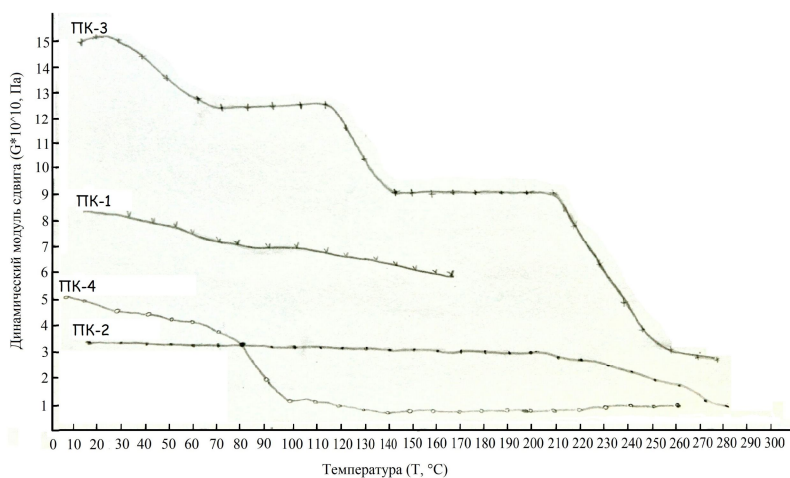


Рис. 1. Температурная зависимость динамического модуля сдвига G для ПК -1, ПК - 2, ПК - 3, ПК -4.

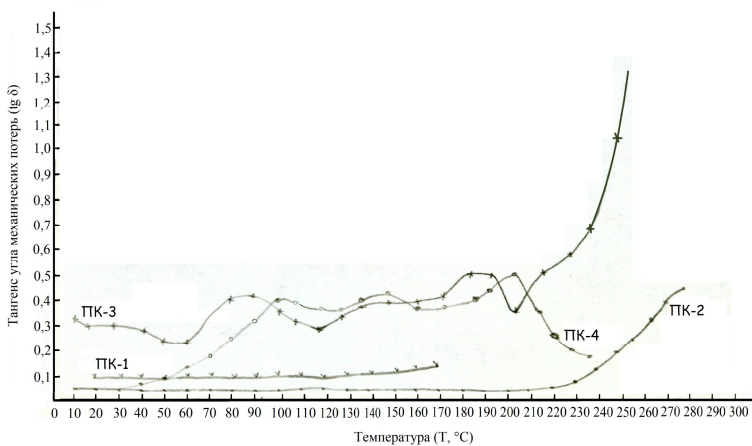


Рис. 2. Температурная зависимость тангенса угла механических потерь для ПК -1, ПК - 2, ПК - 3, ПК - 4.

Таблица 1.
Основные механические свойства композиционных материалов

Полимерный композит	ρ , г/см ³	G, Н/м ²	ΔT , °C
ПК-1	1,49	$8,3 \cdot 10^{10}$	-
ПК-2	1,77	$3 \cdot 10^{10}$	20-230
ПК-3	1,35	$15 \cdot 10^{10}$	70-110 и 140-210
ПК-4	1,45	$4,8 \cdot 10^{10}$	100-250

В табл. 1 ρ – плотность полимерного композита; G – динамический модуль сдвига при $T=20^\circ\text{C}$; ΔT – интервал температур, при котором динамический модуль сдвига постоянен.

Анализируя состав образцов и графики, полученные по экспериментальным результатам, было замечено, что при уменьшении концентрации стеклопорошка и других способах модификации физические свойства композитов существенно изменяются. Например: только при увеличении концентрации стеклопорошка от 2 до 3 единиц (ПК-3 и ПК-1) динамический модуль сдвига заметно уменьшается почти в 2 раза. Эти же изменения отражаются и на температурной зависимости тангенса угла механических потерь (табл. 2).

Таблица 2.
Зависимость тангенса угла механических потерь от температуры стеклования для различных модификаторов

Полимерный композит	$(\text{tg } \delta)_{\text{max}}$	$T(\text{tg } \delta)_{\text{max}}$	$(\text{tg } \delta)_{\text{max}}$ побочное
ПК-1	-	-	-
ПК-2	0,45	280,450	-
ПК-3	2,95	270-300	0,33 и 0,52
ПК-4	0,49	200	0,32 и 0,34

Если сравнить полимерные композиции с одинаковой концентрацией стеклопорошка (ПК-1 и ПК-2), но в ПК-2 введено дополнительно 5% эмульгированного капролактана, то можно отметить, что изменилась не только плотность полимера в 1,18 раза,

но и резко снизился динамический модуль сдвига, хотя образец ПК-2 стал при этом очень эластичным и более стабильным с точки зрения эксплуатационных характеристик [4-5]. Так например, динамический модуль сдвига и тангенс угла механических потерь для ПК-2 остаются неизменными до 250 °С, что позволяет эксплуатировать его в широком интервале температур при сохранении его механических параметров. В свою очередь, прокладка двумя слоями стеклоткани (ПК-4) также ведет к стабильности механических свойств композита, но уже в более узком интервале температур. При этом не происходит ограничения молекулярной подвижности цепей. Таким образом введение стеклопорошка и эмульгированного капролактана ведет не только к демпфированию молекулярной подвижности, но и к уменьшению молекулярного воздействия, что в конечном счете и сказывается на уменьшении динамического модуля сдвига. Причем использование эмульгированного капролактана в качестве модификатора более существенно, чем стеклопорошка.

Выводы:

1. Показано, что механические свойства исследуемых полимерных материалов зависят от температуры.
2. Установлено, что наполнители различного химического строения по разному влияют на температуру стеклования;
3. Показано, что механические свойства полимерного композита определяются не только химическим составом введенного наполнителя, но и его концентрацией.

Список используемой литературы:

1. Вагин В.В., Хамичева Т.В., Насонов А.Д., Маркин В.Б., Аникеева Л.М. «Способ получения полибисмалеинимидных форполимеров» патент №2186793 от 20 марта 2000 г., г. Москва.
2. Насонов, А.Д. Исследование влияния пространственной сетки на вязкоупругие свойства аморфных полимеров низкочастотным акустическим методом / А.Д. Насонов., дис. на соиск... канд. физ.-мат. наук – Барнаул, БГПУ, рукопись, 1980. – 159 с.
3. Перепечко, И.И. Акустические методы исследования полимеров / И.И. Перепечко. – М. : Химия, 1973. – 296 с.
4. Вагин В.В., Насонов А.Д., Степченко В.В. «Исследование механизма образования полималеинимидов». Научно-технические достижения в области наполненных пластиков, применяемых в машиностроении. Общество «Знание» РСФСР, Московский Дом научно-технической пропаганды им. Ф.Э. Дзержинского. М: 1987 г., с70-75.

5. Калинин М.А., Насонов А.Д., Лагуткина Е.В., Голубь П.Д. «Исследование вязкоупругих свойств стеклообразных полимеров на основе полиимидного связующего» г. Улан-Удэ, «Вестник Бурятского государственного университета» вып.3, 2011 г., серия «Химия и физика», с244-246.

ВЛИЯНИЕ МИНЕРАЛЬНОГО НАПОНИТЕЛЯ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СТЕКЛОПЛАСТИКОВ

Насонов А. Д., Бетеньков Ф. М., Новичихина Т.И., Зарецких А.А.

Алтайский государственный педагогический университет,

г. Барнаул

E-mail: bfm1982@yandex.ru

В настоящее время стеклопластики достаточно широко используются в различных отраслях производства. Большой интерес вызывает возможность снижения стоимости данного вида продукции и улучшения его эксплуатационных характеристик за счет использования дешевых и эффективных минеральных наполнителей, таких как волластонит [1]. Игольчатая структура волластонита позволяет создать в композиционном материале эффект микроармирования, что в свою очередь, приводит к изменению механических и прочностных показателей [2].

В качестве объекта исследования были выбраны стеклопластики на основе эпоксидной смолы Epikote-828 (зарубежный аналог эпоксидной смолы ЭД-20) и стеклоткани ЭЗ-200. В качестве наполнителя использовался волластонит марки Воксил-100М. Степень наполнения составила 0-30% от массы связующего. Готовая композиция проходила многостадийный процесс отверждения.

Для исследования вязкоупругих характеристик стеклопластиков использовался метод динамического механического анализа (ДМА). Метод ДМА хорошо зарекомендовал себя при измерении свойств полимеров, результаты, полученные с помощью данного метода, содержат широкий спектр информации, что делает его весьма привлекательным для исследования материалов такого класса [3]. Во-первых, динамический механический анализ дает сведения о механических показателях в стеклообразном и высокоэластическом состояниях полимера (динамический модуль сдвига G' и тангенс угла механических потерь $\tan \delta$), включаемых в регистрационные сертификаты материалов. Во-вторых, с его помощью получается информация о молекулярной подвижности, фазовых и релаксационных

переходах, физических и химических процессах, происходящих в композите.

Погрешность измерения G' для полимеров с $G' \geq 10^8 \text{ Па}$ составляет 3%. Точность поддержания температуры в термокамере - $0,5^\circ\text{C}$. Погрешность измерения $\text{tg}\delta$ составляет 3%.

Определение температуры стеклования производилось по методике описанной ранее [4, 5] при помощи метода аппроксимации зависимости G' от температуры и последующего нахождения первой и второй производных от функции, выражающей данную зависимость.

Результаты и обсуждение

В ходе эксперимента были получены температурные зависимости динамического модуля сдвига G' и тангенса угла механических потерь $\text{tg}\delta$, представленные на рис. 1. Также были получены зависимости первой (dG'/dT) и второй производной (d^2G'/dT^2) динамического модуля сдвига по температуре представленные на рис. 2 [5].

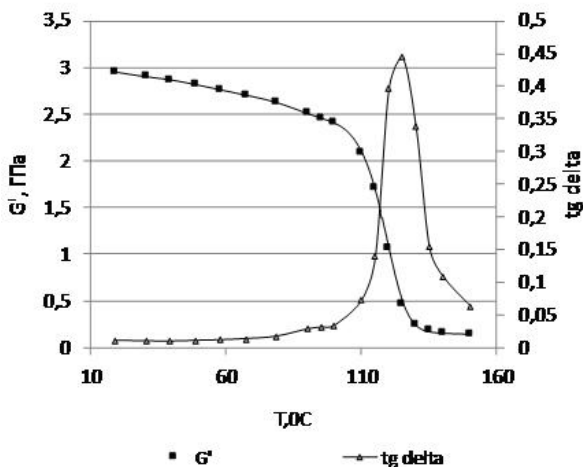


Рис. 1. Температурная зависимость динамического модуля сдвига G' и тангенса угла механических потерь $\text{tg}\delta$ для исходного стеклопластика

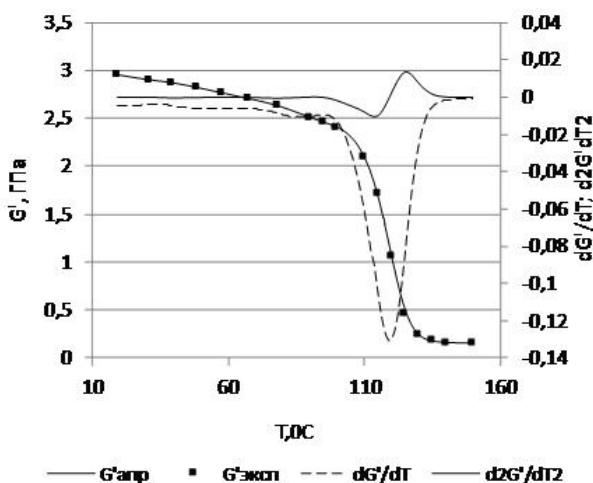


Рис. 2. Температурная зависимость первой и второй производной динамического модуля сдвига G' по температуре для исходного стеклопластика.

Анализ полученных температурных зависимостей G' и $\text{tg}\delta$ показал, что волластонит оказывает характерное влияние на изменение температуры стеклования (см. табл. 1) [6].

Таблица 1.

Влияние концентрации волластонита на температуру стеклования T_c и динамический модуль сдвига в стеклообразном состоянии $G'_{\text{стекл}}$ исследуемых стеклопластиков

Вязкоупругие характеристики стеклопластика	Концентрация наполнителя – n, %						
	0	5	10	15	20	25	30
$T_c, ^\circ\text{C}$	119	121	120	122	122	124	126
$G'_{\text{стекл}}, \text{ГПа}$	2,9	2,34	2,18	3,14	3,31	2,92	2,62

Если на начальной стадии введения наполнителя T_c возрастает в среднем на 2°C , то при введении наполнителя в количестве 30% ее увеличение составляет 7°C . По-видимому, такое монотонное увеличение T_c связано с ростом межмолекулярного взаимодействия.

Известно, что величина динамического модуля сдвига в области стеклообразного состояния является одним из показателей прочности ПКМ [3]. Изменение величины G' в стеклообразном состоянии (см.

табл. 1) показывает, что при наполнении волластонитом величина модуля сдвига изменяется, но характер изменения G' в зависимости от концентрации наполнителя носит сложный характер. Очевидно, что в данном случае для выяснения механизма влияния волластонита на надмолекулярную организацию связующего требуется дополнительный материал.

Выводы:

-показано, что при введении в стеклопластик до 30% волластонита наблюдается рост температуры стеклования;

-отмечено также, что величина динамического модуля сдвига в стеклообразном состоянии зависит от концентрации наполнителя и эта зависимость носит сложный характер.

Список литературы

1. Тильнина, В.А. Волластонит – уникальное минеральное сырье многоцелевого назначения [Текст] / В.А. Тильнина и др.; М.: Руда и металлы, 2003. – 144 с.

2. Насонов, А.Д. Волластонит - эффективный дисперсный наполнитель для полимерных материалов [Текст] / А.Д. Насонов, Ф.М. Бетеньков, А.В. Кайзер, М.Б. Кондратенко // Информационный листок № 02-014-07: Алтайский центр научно-технической информации, 2007. – 6с.

3. Перепечко, И.И. Акустические методы исследования полимеров [Текст] / И.И. Перепечко; М.: Химия, 1973. – 295 с.

4. Бетеньков, Ф.М. Акустическое исследование физико-механических свойств фрикционных полимерных композитных материалов [Текст] / Ф.М. Бетеньков, А.Д. Насонов, А.А. Викторов, А.М. Белоусов // Ультразвук и термодинамические свойства вещества: Сб. научн. трудов, вып.33; гл. ред. Ю.Ф. Мелихов; РАО. – Курск: КГУ, 2006. – С. 45-49.

5. Исупов, В.В. Численные методы в динамической механической спектроскопии полимеров [Текст] / В.В. Исупов, О.В. Старцев // Математические модели и численные методы механики сплошных сред: Международная конференция, 27 мая-2 июня 1996; Новосибирск: СОРАН, 1996. – С. 292-293.

6. Кайзер, А.В. Влияние дисперсного наполнителя на физико-механические свойства композиционных материалов [Текст] / А.В. Кайзер, Ф.М. Бетеньков // «Полимер - 2007», 25-26 мая 2007 года: Материалы I-ой Региональной научно-практической конференции

студентов, аспирантов и молодых ученых; БТИ. – Бийск: АлтГТУ, 2007. – С. 34-35.

АНАЛИЗ ДИАГРАММ СОСТОЯНИЯ РЗМ С 3p-МЕТАЛЛАМИ

Новожинов А.В., Стручева Н.Е., Белова О.В.
Алтайский государственный университет, Барнаул
Email: novozhenov@email.asu.ru

Диаграммы состояния с 3p-металлами построены практически для всех членов ряда редкоземельных металлов [1,2]. Из всего ряда РЗМ с алюминием не построена диаграмма состояния с лютецием, предполагаемый вид такой диаграммы состояния приведен в [3,4]. Методы построения диаграмм состояния и состав фаз в системах достаточно хорошо описаны как в оригинальных работах, так и в обзорах, посвященных редкоземельным металлам и их сплавам с 3p-металлами [1,2]. В системах обнаружено от 4 до 7 интерметаллических соединений, которые имеют температуры плавления или перитектического распада выше температур плавления исходных металлов. Со стороны 3p-металла эвтектики сдвинуты к температуре плавления 3p-металла. Но, несмотря на достаточно большое сходство, в системах наблюдается большое различие. Так, в системах РЗМ с алюминием и галлием, большинство наиболее устойчивых металллов имеют состав LnX_2 (X-Al и Ga). В системах РЗМ с индием и таллием состав металллов с конгруэнтными точками плавления более широк: LnX , LnX_2 (для европия и иттербия), LnX_3 , Ln_3X_5 , Ln_5X_3 . Состав интерметаллических соединений РЗМ с 3p-металлами приведен в табл. 1-6.

Таблица 1
Интерметаллические соединения РЗМX_2 с 3p-металлами

Металлид	$T_{\text{пл}}$, К	Металлид	$T_{\text{пл}}$, К	Металлид	$T_{\text{пл}}$, К	Металлид	$T_{\text{пл}}$, К
ScAl_2	1693	ScGa_2	1413	ScIn_2^*	1243	ScTl_2	нет
YAl_2	1758	YGa_2	1623	YIn_2	нет	YTl_2	нет
LaAl_2	1678	LaGa_2	1723	LaIn_2^*	1426	LaTl_2	нет
CeAl_2	1753	CeGa_2	1733	CeIn_2^*	нет	CeTl_2	нет
PrAl_2	1753	PrGa_2	1743	PrIn_2	нет	PrTl_2	нет
NdAl_2	1733	NdGa_2	1728 1761	NdIn_2	нет	NdTl_2	нет
SmAl_2	1753	SmGa_2	1663	SmIn_2	нет	SmTl_2	нет
EuAl_2	1573	EuGa_2	1303	EuIn_2	1253	EuTl_2^{**}	850
GdAl_2	1798	GdGa_2	1673	GdIn_2	нет	GdTl_2	нет

TbAl ₂	1797	TbGa ₂	1653	TbIn ₂	нет	TbTl ₂	нет
DyAl ₂	1753	DyGa ₂	1603	DyIn ₂	нет	DyTl ₂	нет
HoAl ₂	1803	HoGa ₂	1543	HoIn ₂	нет	HoTl ₂	нет
ErAl ₂	1728	ErGa ₂ *	1553	ErIn ₂	1360	ErTl ₂	нет
TmAl ₂	He уст.	TmGa ₂	1513	TmIn ₂	нет	TmTl ₂	нет
YbAl ₂	1633	YbGa ₂	1393 1373	YbIn ₂	1163	YbTl ₂	нет
LuAl ₂ [3]	~1773	LuGa ₂ *	1443	LuIn ₂ *	1253	LuTl ₂	нет

*-распад по перитектической реакции; **- распад по эвтектической реакции

Как видно из табл. 1-4 наблюдается значительное отличие состава интерметаллических соединений в системах РЗМ с 3р-металлами. Для систем РЗМ с алюминием и галлием характерно образование металллов состава LnX₂ с конгруэнтной точкой плавления, за исключением ErGa₂ и LuGa₂, которые испытывают перитектический распад при 1553 и 1443 К соответственно. В системах индия большинство соединений LnIn₂ образуются по перитектическим реакциям. Только для скандия, лантана, европия, эрбия и иттербия установлено существование металллов LaIn₂, EuIn₂, ErIn₂, YbIn₂, имеющие конгруэнтные точки плавления. В системах таллия с РЗМ такие соединения практически отсутствуют. Для систем таллия с РЗМ известен только один металллов EuTl₂, претерпевающий распад по эвтектической реакции при 850 К.

Таблица 2
Интерметаллические соединения РЗМХ с 3р-металлами

Металлов	T _{пл.} К	Металлов	T _{пл.} К	Металлов	T _{пл.} К	Металлов	T _{пл.} К
ScAl	1573	ScGa*	1363	ScIn*	1393	ScTl	~1673
YAl*	1403	YGa	1658	YIn*	1493	YTl*	1493
LaAl*	1146	LaGa*	1283	LaIn	1398	LaTl	1333
CeAl*	1118	CeGa*	1228	CeIn	1410	CeTl	1483
PrAl	1178	PrGa	1288	PrIn	1459	PrTl	1533
NdAl	1213	NdGa	1203 1363	NdIn	1393 1503	NdTl	1533
SmAl [4]	1253	SmGa	1378	SmIn	1503	SmTl	1493
EuAl	~1200	EuGa	923	EuIn	1188	EuTl	1300
GdAl	1348	GdGa	1473	GdIn	1533	GdTl	1545
TbAl[7]	1352	TbGa	1483	TbIn	1533	TbTl	1573
DyAl	1376	DyGa	1553	DyIn	1533	DyTl	1560
HoAl	1388	HoGa*	1533	HoIn	1543	HoTl*	1480
ErAl	1338	ErGa	1613	ErIn	1490	ErTl*	1480
TmAl	He уст.	TmGa	1593	TmIn*	1483	TmTl*	1455

YbAl	He уст.	YbGa* YbGa	1163 1163	YbIn	1340	YbTl	1400
LuAl	He уст.	LuGa	1623	LuIn*	1353	LuTl*	1320

*-металлиды распадаются по перитектическим реакциям

Таблица 3

Интерметаллические соединения РЗМ₅X₃ с 3р-металлами

Металлид	T _{пл.} К	Металлид	T _{пл.} К	Металлид	T _{пл.} К	Металлид	T _{пл.} К
Sc ₅ Al ₃	Нет	Sc ₅ Ga ₃	1703	Sc ₅ In ₃ *	1693	Sc ₅ Tl ₃	-
Y ₅ Al ₃	Нет	Y ₅ Ga ₃ *	1568	Y ₅ In ₃	1613	Y ₅ Tl ₃	1713
La ₅ Al ₃	Нет	La ₅ Ga ₃ *	1098	La ₅ In ₃	нет	La ₅ Tl ₃ *	1223
Ce ₅ Al ₃	Нет	Ce ₅ Ga ₃ *	1103	Ce ₅ In ₃	нет	Ce ₅ Tl ₃ *	1313
Pr ₅ Al ₃	Нет	Pr ₅ Ga ₃ *	1128	Pr ₅ In ₃	нет	Pr ₅ Tl ₃ *	1293
Nd ₅ Al ₃	Нет	Nd ₅ Ga ₃ *	1163	Nd ₅ In ₃	нет	Nd ₅ Tl ₃ *	1318
Sm ₅ Al ₃	Нет	Sm ₅ Ga ₃ *	1243	Sm ₅ In ₃	нет	Sm ₅ Tl ₃ *	1333
Eu ₅ Al ₃	Нет	Eu ₅ Ga ₃ *	880	Eu ₅ In ₃	нет	Eu ₅ Tl ₃	нет
Gd ₅ Al ₃	Нет	Gd ₅ Ga ₃ *	1373	Gd ₅ In ₃ *	1440	Gd ₅ Tl ₃ *	1480
Tb ₅ Al ₃	Нет	Tb ₅ Ga ₃ *	1403	Tb ₅ In ₃ *	1460	Tb ₅ Tl ₃	1545
Dy ₅ Al ₃	Нет	Dy ₅ Ga ₃ *	1483	Dy ₅ In ₃ *	1590	Dy ₅ Tl ₃ Dy ₅ Tl ₃ *	1600 1473
Ho ₅ Al ₃	нет	Ho ₅ Ga ₃ *	1503	Ho ₅ In ₃ *	1523	Ho ₅ Tl ₃	1645
Er ₅ Al ₃	нет	Er ₅ Ga ₃	1593	Er ₅ In ₃	1540	Er ₅ Tl ₃	1700
Tm ₅ Al ₃	нет	Tm ₅ Ga ₃	1613	Tm ₅ In ₃	1543	Tm ₅ Tl ₃	1680
Yb ₅ Al ₃	нет	Yb ₅ Ga ₃ *	953 923	Yb ₅ In ₃	нет	Yb ₅ Tl ₃	нет
Lu ₅ Al ₃	нет	Lu ₅ Ga ₃	1693	Lu ₅ In ₃	1560	Lu ₅ Tl ₃	1720

- - металлиды распадаются по перитектическим реакциям

Интерметаллические соединения состава LnX₃ известны для всех систем РЗМ с 3р-металлами. Но для систем алюминий - РЗМ такие металлиды имеют инконгруэнтные точки плавления. В системах РЗМ-галлий металлиды LnGa₃ достоверно установлены для систем с галлием редкоземельных металлов иттриевой подгруппы. Для систем с галлием РЗМ цериевой подгруппы существование соединений такого состава были предсказаны в работе [5] и показано их существование в наших работах [6]. Все металлиды LnGa₃ имеют инконгруэнтные точки плавления, за исключением TbGa₃, которое имеет конгруэнтную точку плавления. В системах индий с РЗМ все металлиды LnIn₃ имеют конгруэнтные точки плавления, за исключением ScIn₃ и YbIn₃, имеющих инконгруэнтные точки плавления.

Таблица 4

Интерметаллические соединения РЗМХ₃ с 3р-металлами

Металлид	T _{пл} , К	Металлид	T _{пл} , К	Металлид	T _{пл} , К	Металлид	T _{пл} , К
ScAl ₃ *	1573	ScGa ₃ *	1303	ScIn ₃ *	1183	ScTl ₃	нет
YAl ₃ *	1253	YGa ₃	нет	YIn ₃	1383	YTl ₃ *	1153
LaAl ₃ *	1363	LaGa ₃ *	>700	LaIn ₃	1413	LaTl ₃	1493
CeAl ₃ *	1408	CeGa ₃ *	>700	CeIn ₃	1450	CeTl ₃	1333
PrAl ₃ *	1348	PrGa ₃ *	>700	PrIn ₃	1486	PrTl ₃	1338
NdAl ₃ *	1478	NdGa ₃ *	>700	NdIn ₃	1493	NdTl ₃	1338
SmAl ₃ *	1403	SmGa ₃	нет	SmIn ₃	1493	SmTl ₃	1145
EuAl ₃	нет	EuGa ₃	нет	EuIn ₃	нет	EuTl ₃	870
GdAl ₃ *	1398	GdGa ₃ *	>900	GdIn ₃	1443	GdTl ₃	1263
TbAl ₃ *	1383[7]	TbGa ₃	1283	TbIn ₃	1413	TbTl ₃	1213
DyAl ₃ *	1380	DyGa ₃ *	1073	DyIn ₃	1423	DyTl ₃ *	1180
HoAl ₃ *	1360	HoGa ₃ *	1143	HoIn ₃	1383	HoTl ₃ *	1150
ErAl ₃ *	1343	ErGa ₃ *	1233	ErIn ₃	1365	ErTl ₃ *	1124
TmAl ₃ *	He уст.	TmGa ₃ *	1233	TmIn ₃	1373	TmTl ₃ *	1070
YbAl ₃ *	1253	YbGa ₃	1028	YbIn ₃ *	903	YbTl ₃ *	850
LuAl ₃	He уст.	LuGa ₃ *	1203	LuIn ₃	1233	LuTl ₃ *	910

*-металлиды распадаются по перитектическим реакциям.

В системах таллия металлиды LnTl₃ РЗМ цериевой подгруппы имеют конгруэнтные точки плавления. Для LnTl₃ иттриевой подгруппы характерны инконгруэнтные точки плавления. Только GdTl₃ и TbTl₃ имеют конгруэнтные температуры плавления.

Интерметаллические соединения эквиатомного состава LnX установлены для всех систем РЗМ-3р-металл. Практически все они имеют конгруэнтные температуры плавления, за исключением YAl, LaAl, CeAl, ScGa, LaGa, CeGa, HoGa, YbGa, ScIn, YIn, TmIn, LuIn. Для систем таллия с РЗМ металлиды эквиатомного состава от лантана до диспрозия имеют конгруэнтные точки плавления. Металлиды LnTl от гольмия до лютеция, за исключением YbTl, имеют инконгруэнтные точки плавления.

Металлиды состава Ln₅X₃ отсутствуют в системах алюминия с РЗМ. В системах других 3р-металлов соединения такого состава установлены для всех РЗМ, кроме систем европия и иттербия с индием и таллием. Металлиды Ln₅Ga₃ имеют инконгруэнтные температуры плавления, за исключением Sc₅Ga₃, Er₅Ga₃, Tm₅Ga₃ и Lu₅Ga₃, имеющих конгруэнтные точки плавления. Для систем индия и таллия с РЗМ большинство металлидов такого состава имеют конгруэнтные точки плавления. Но, если для систем индия металлиды Ln₅In₃ с инконгруэнтными точками плавления располагаются в ряду иттриевой

подгруппы: от гадолиния до гольмия, то в системах таллия металлidy Ln_5Tl_3 , имеющие инконгруэнтные температуры плавления, расположены преимущественно в цериевой подгруппе. Из РЗМ иттриевой подгруппы только Gd_5Tl_3 и Dy_5Tl_3 претерпевают перитектический распад.

Из интерметаллических соединений другого состава известны металлidy $\text{Ln}_3\text{Al}_{11}$, которые установлены только для систем лантана, церия, празеодима и неодима с алюминием. В системах других 3р-металлов металлidy с РЗМ аналогичного состава отсутствуют.

Из металлidy, богатых редкоземельным металлом, в системах установлено существование соединений составов Ln_2X и Ln_3X . Состав и температуры плавления интерметаллических соединений Ln_2X и Ln_3X приведены в табл. 5-6.

Таблица 5

Интерметаллические соединения РЗМ с 3р-металлами состава Ln_2X

Металлид	T _{пл.} К	Металлид	T _{пл.}	Металлид	T _{пл.} К	Металлид	T _{пл.} К
Sc_2Al	1468	Sc_2Ga	1338	Sc_2In	1613	Sc_2Tl	
Y_2Al^*	1258	Y_2Ga	Нет	Y_2In^*	1603	Y_2Tl^*	1710
La_2Al^*	Нет	La_2Ga	Нет	La_2In^*	1228	La_2Tl^*	1178
Ce_2Al^*	Нет	Ce_2Ga	Нет	Ce_2In^*	1230	Ce_2Tl^*	1223
Pr_2Al^*	1008	Pr_2Ga	Нет	Pr_2In^*	1290	Pr_2Tl^*	1213
Nd_2Al^*	1068	Nd_2Ga^*	1157	Nd_2In^*	1343	Nd_2Tl^*	1318
Sm_2Al^*	1139[8,9,9a]	Sm_2Ga	Нет	Sm_2In^*	1353	Sm_2Tl^*	1295
Eu_2Al	Нет	Eu_2Ga	Нет	Eu_2In^*	980	Eu_2Tl^*	1020
Gd_2Al^*	1225	Gd_2Ga	Нет	Gd_2In	1443	Gd_2Tl^*	1320
Tb_2Al [7]	1233	Tb_2Ga	Нет	Tb_2In	1453	Tb_2Tl^*	1360
Dy_2Al^*	1413	Dy_2Ga	Нет	Dy_2In	1533	Dy_2Tl^*	1570
Ho_2Al	1291	Ho_2Ga^*	Нет	Ho_2In	1513	Ho_2Tl^*	1568
Er_2Al^*	1303	Er_2Ga	Нет	Er_2In^*	1500	Er_2Tl^*	1630
Tm_2Al	He уст.	Tm_2Ga^*	1553	Tm_2In	1473	Tm_2Tl^*	1630
Yb_2Al	Нет	Yb_2Ga^*	923	Yb_2In^*	1093	Yb_2Tl^*	1085
Lu_2Al^* [3]	He уст.	Lu_2Ga^*	1443	Lu_2In^*	1463	Lu_2Tl^*	Нет

*- металлidy с перитектическими точками плавления

Металлidy Ln_2X установлены для одиннадцати систем с алюминием и для пяти систем РЗМ - галлий. Но они установлены практически для всех систем РЗМ – индий и РЗМ - таллий.

Из табл. 6 видно, что металлidy состава Ln_3X образуются в системах РЗМ-3р-металлы только для РЗМ цериевой подгруппы.

Таблица 6

Интерметаллические соединения РЗМ с 3p-металлами состава Ln_3X

Металлид	T _{пл.} К	Металлид	T _{пл.} К	Металлид	T _{пл.} К	Металлид	T _{пл.} К
Sc_3Al	Нет	Sc_3Ga	Нет	Sc_3In^*	1613	Sc_3Tl	-
Y_3Al^*	Нет	Y_3Ga	Нет	Y_3In^*	Нет	Y_3Tl	Нет
La_3Al^*	793	La_3Ga^*	888	La_3In^*	1089	La_3Tl	Нет
Ce_3Al^*	918	Ce_3Ga^*	773 830	Ce_3In^*	1180	Ce_3Tl^*	1053
Pr_3Al^*	923	Pr_3Ga Pr_9Ga_4	853 928 1059	Pr_3In^*	1040	Pr_3Tl^*	1073
Nd_3Al^*	948	Nd_3Ga Nd_9Ga_4	928 1059	Nd_3In^*	1203	Nd_3Tl^*	1068
Sm_3Al	Нет	Sm_3Ga Sm_9Ga_4	735 1146	Sm_3In	1283	Sm_3Tl	Нет
Eu_3Al	Нет	Eu_3Ga	Нет	Eu_3In	Нет	Eu_3Tl	Нет
Gd_3Al	Нет	Gd_3Ga	Нет	Gd_3In	Нет	Gd_3Tl	Нет
Tb_3Al	Нет	Tb_3Ga	Нет	Tb_3In	Нет	Tb_3Tl	Нет
Dy_3Al	Нет	Dy_3Ga	Нет	Dy_3In	Нет	Dy_3Tl	Нет
Ho_3Al	Нет	Ho_3Ga^*	Нет	Ho_3In	Нет	Ho_3Tl^*	Нет
Er_3Al	Нет	Er_3Ga	Нет	Er_3In	Нет	Er_3Tl^*	Нет
Tm_3Al	Не уст.	Tm_3Ga	Нет	Tm_3In	Нет	Tm_3Tl^*	Нет
Yb_3Al	Нет	Yb_3Ga	Нет	Yb_3In	Нет	Yb_3Tl	Нет
Lu_3Al	Не уст.	Lu_3Ga	Нет	Lu_3In^*	Нет	Lu_3Tl^*	Нет

Таким образом, во всех системах РЗМ-3p-металлы присутствуют металлиды эквивалентного состава (LnX) и металлиды состава LnX_3 . В большей части систем РЗМ с галлием, индием и таллием присутствуют металлиды состава Ln_5X_3 , отсутствующие в системах с алюминием.

Диаграммы состояния РЗМ с 3p-металлами имеют много сходного, но и достаточно много различий. Эти различия связаны как с характеристиками РЗ металлов, так и с характеристиками 3p-металлов. Свойства РЗМ по ряду изменяются не монотонно. Свойства 3p-металлов также по группе изменяются не монотонно, вследствие изменения электронных оболочек атомов. Появление в электронных структурах атомов галлия и таллия кайносимметричных 3d-орбиталей и 4f-орбиталей оказывает существенное влияние на физико-химические свойства металлов. По многим свойствам галлий ближе находится к алюминию, таллий – к индию. Большое значение при взаимодействии металлов имеет кристаллическое строение компонентов при плавлении и после плавления.

Металлический алюминий вследствие коллективизации валентных $3s^23p^1$ электронов и перекрывания сферических $3s^2$ -

оболочек имеет вплоть до температуры плавления (933,5 К) ГЦК плотную структуру. После плавления у алюминия должен сохраняться ближний порядок, соответствующий ГЦК - структуре. Это подтверждается и рентгенографическими, электронографическими и нейтронографическими исследованиями [10, 11]: алюминий до температуры 1073-1173 К сохраняет наноструктуру ГЦК. Выше этих температур наблюдается постепенный переход к наноструктуре ОЦК и затем в неупорядоченное строение. Координационное число алюминия после плавления лежит в пределах 10,8-2,88 и расстояние между атомами $d = 2,88 \text{ \AA}$. Вследствие расщепления p^6 -оболочек алюминий может образовывать с РЗМ интерметаллические соединения типа CsCl. И такие соединения образуются в системах Sc, β -Y, La, Ce, Pr, Nd, Sm, Gd.

Внешняя валентная оболочка галлия имеет строение $4s^2 4p^1$. Вследствие sp^2 -гибридизации и образования трех ковалентных связей каждым атомом галлия образуется слоистая ромбическая ковалентно - металлическая кристаллическая структура, построенная из гексагональных сеток и имеющая металлическую проводимость. При плавлении ковалентные связи разрушаются и три валентных электрона коллективизируются. Перекрывание $3s^2$ - электронов приводит к плотнейшей упаковке атомов галлия в жидком состоянии. При этом объем уменьшается на 3,2 %. Вследствие того, что галлий имеет на предвнешнем уровне $3d^{10}$ - подуровень, это приводит к тому, что галлий не образует с РЗМ интерметаллические соединения с ОЦК структурой типа CsCl, а соединения такого состава имеют кристаллическую структуру типа CгВ. Дифракционные исследования показали, что жидкий галлий имеет плотноупакованную ГЦК структуру [11], которая при дальнейшем нагревании переходит в ОЦК структуру. Координационное число в структуре жидкого галлия равно 11,0, расстояние между атомами $d = 2,77 \text{ \AA}$.

Индий – элемент пятого периода и имеет $5s^2 5p^1$ – валентные электроны. Вследствие перекрывания $5s^2$ – электронов и коллективизации $5p^1$ – электронов индий образует гранецентрированную тетрагональную структуру, которая близка к плотной кубической структуре. Как показывают экспериментальные исследования жидкого индия при плавлении (429,8 К) [12] не происходит расщепления $4d^{10}$ -подуровня и сохраняется гранецентрированная тетрагональная структура. При 443 К жидкий индий имеет $KЧ = 10,7$, которое при нагревании до 553 К увеличивается до 11,7. Это соответствует уменьшению тетрагональности ($KЧ = 4+8$) и

постепенному переходит в жидкую ГЦК структуру. Расстояние между атомами индия $d = 3,30 \text{ \AA}$. При нагреве до 773-923 К координационное число уменьшается до 8-9,4. Это указывает на возможность структурного перехода наноструктур ближнего порядка в жидком индии из ГЦК в ОЦК. Вследствие этого, индий образует с РЗМ интерметаллические соединения типов CsCl и AuCu_3 , большинство из которых имеют конгруэнтные точки плавления.

Электронная конфигурация таллия отличается от электронных конфигураций своих соседей по подгруппе наличием сверх структуры инертного газа аргона 4f-подуровня: $4f^{14}5d^{10}6s^26p^1$. Вследствие коллективизации трех валентных электронов и перекрывания $6s^2$ – оболочек таллий имеет до температуры 507 К ПГ – структуру. Выше температуры плавления в связи расщеплением и перекрыванием $5d^6$ -подоболочки (t_{2g} -подуровень) переходит в ОЦК β -модификацию, которая устойчива до температуры плавления (577 К). Жидкий таллий имеет межуатомное расстояние $d = 3,30 \text{ \AA}$, что близко к $d = 3,35 \text{ \AA}$ соответствующее ОЦК β -таллия. Координационное число жидкого таллия 10,0-11,5. Это приводит к тому, что для таллия, как и для индия, характерно образование с РЗМ металлидов со структурными типами CsCl и AuCu_3 .

Редкоземельные металлы имеют электронные конфигурации $4f^n5s^25p^65d^16s^2$. Вследствие коллективизации трех электронов ($5d^16s^2$) и перекрытием $5p^6$ – оболочек они имеют высокотемпературные ОЦК - модификации $\gamma\text{-La}$, $\delta\text{-Ce}$, $\beta\text{-Pr}$, $\beta\text{-Nd}$, $\beta\text{-Pm}$, $\beta\text{-Sm}$, $\beta\text{-Eu}$, $\beta\text{-Gd}$, $\beta\text{-Tb}$, $\beta\text{-Dy}$, $\beta\text{-Yb}$ и т.д. Экспериментальные исследования показывают, что у гольмия, эрбия, тулия и лютеция ПГ - структура сохраняется до температуры плавления. В работе [10] прогнозируется, что эти металлы перед плавлением приобретают структуру ОЦК. После плавления все РЗМ должны иметь ОЦК наноструктуру.

В соответствие с нашими исследованиями температур начала реакций РЗМ с Зр-металлами, взаимодействие металлов начинается при температуре плавления (с алюминием) или при температурах на 100-200 градусов выше плавления Зр-металла. Это приводит к тому, что РЗМ сохраняют структуру при взаимодействии, а Зр-металлы изменяют кристаллические решетки и наноструктурные группировки ближнего порядка при плавлении и нагревании до температуры взаимодействия. Вследствие того, что наноструктуры различны для ряда Зр-металлов отличаются и составы интерметаллических соединений, которые наблюдаются на диаграммах состояния.

Литература

1. Диаграммы состояния двойных металлических систем. Справочник. Под ред. акад. Лякишева Н.М. М.: Машиностроение. 1999. Т.3. Кн. 1. 872 с.
2. Новоженев В.А. Металлохимия сплавов редкоземельных металлов с 3p-металлами. Барнаул. Изд-во АлтГУ. 2003. С. 193-195.
3. Okamoto H. Al-Lu (Aluminium-Lutetium). //J. Phase Equilibria. 1993. Vol. 14. № 3.
4. Okamoto H., Massalski T.B. Guidelines for binary phase Diagram Assesment. //J. Phase Equilibria. 1993. 14(3). P.316-335.
5. Савицкий Е.М., Грибуля В.Б. Прогнозирование неорганических соединений с помощью ЭВМ. М.: Наука. 1977. 236 с.
6. Новоженев В.А. Термохимия и некоторые свойства сплавов редкоземельных металлов цериевой группы с галлием и индием. Канд. дисс. Томск. 1976. 160 с.
7. Ferro R., Delfino S, Borzone G., Saccone A., Cacciamani G. Comment on Al-Tb (Aluminum-Terbium) //J. of Phase Equilibria. 1994. Vol. 15. No 1.
8. H. Okamoto, Al-Sm (Aluminum-Samarium). J. of Phase Equilibria and Diffusion. Vol.33. No 3.2012.
9. H. Okamoto, Al-Sm (Aluminum-Samarium). J. of Phase Equilibria and Diffusion. 2008. Vol.29. No 2. P.200.
- 9a. Delsante S., Raggio R, Borzone G., Ferro R. A Revision of the Al-rich Region of the Sm-Al Phase Diagram:The $\text{Sm}_3\text{Al}_{11}$ Phase. //Phase Equilibria and Diffusion. 2007. 28(3). P. 240-242
10. Ватолин Н.А., Пастухов Э.А. Дифракционные исследования строения высокотемпературных расплавов. М.: Наука. 1980. 190 с.
11. Хрущев Б.И. Структура жидких металлов. Ташкент. ФАН.1970. 112 с.
12. Григорович В.К. Металлическая связь и структура металлов. М.: Наука. 1988. 296 с.

МОНИТОРИНГ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО СМОГА В АНИЗОТРОПНОЙ СРЕДЕ

Андрухова Т.В.*, Андрухова О.В.

**Алтайский государственный университет, Барнаул, Россия*

E-mail: atvtata123@mail.ru

Промышленные инфраструктуры, объекты электроэнергетики, оказывают значительное влияние на окружающую среду. Большое число различных энергообъектов, являющихся источниками электромагнитных излучений, приводит к ухудшению электромагнитной обстановки (ЭМО). При этом интенсивность искусственных электромагнитных полей (ЭМП), обладающих различными пространственно-временными характеристиками, многократно превосходит уровень естественного электрического (ЭП) и магнитного поля (МП) Земли. Развитие технического прогресса, создание все новых и новых приборов и устройств резко расширяется частотный диапазон ЭМП полей.

Мониторинг природной среды по ЭМ фактору серьезная теоретическая и технико-экономическая задача, тесно связанная с проблемой защиты окружающей среды и человека от неблагоприятного воздействия электромагнитных полей [1]. Основными этапами электромагнитного мониторинга, являются:

- инструментальный контроль электромагнитной обстановки на стадии эксплуатации объектов и их комплексов;
- разработка мероприятий и рекомендаций по защите от ЭМП и нормализации электромагнитной обстановки.

Оценка ЭМО, реальных уровней напряженности ЭП и МП вблизи электроэнергетических объектов с учетом схемно-режимных особенностей исследуемого участка – сложная научно-техническая проблема.

На наличие электромагнитного смога исследовался парк культуры и отдыха Центрального района города Барнаула, находящийся по адресу пр. Социалистический, 11. Так как парк является наиболее посещаемым детьми и их родителями объектом в период летних каникул, а дети в силу их физических особенностей, наиболее подвержены негативному влиянию ЭМП.

Все измерения проводись «ME-3030B» – сертифицированным анализатором электросмога по международным нормам TCO и MPR, представляющий собой цифровой переносной прибор и служащий для одновременного измерения всех пространственных координат поля с

вычислением модуля вектора напряженности поля и непрерывной визуальной индикацией полученного значения. Диапазон измерения электрического переменного поля от 1 до 2000 В/м, магнитного поля от 1 до 2000 нТл. Частотный диапазон: 16 Гц–2 кГц. Точность прибора составляет 2 %.

Воздействие электромагнитных полей может носить характер: изолированного от одного источника; сочетаемого от двух и более источников одного частотного диапазона; смешанного от двух и более источников электромагнитных полей различных частотных диапазонов; комбинированного в случае действия какого-либо другого неблагоприятного нормируемого воздействующего фактора. Исследуемый объект характеризуется наличием на нем трансформаторной подстанции, линией электропередач (двухпроводная линия), распределительными щитами.

Контроль ЭМП проводился как в период максимальной загрузки (выходные и праздничные дни), так и минимальной (будний день с соответствующей погодой). Общая картина распределения ЭМП в разное время замеров существенно не отличалась.

Для удобства проведения измерений исследуемая территория парка разбивалась на два участка прямоугольной формы, составлялась карта-план с нанесением на них источников ЭМ излучений и точек замеров напряженности электрического поля и магнитной индукции на высотах от 0, 5 до 1, 8 м от поверхности земли. Расстояние между точками составляло 1, 5 метра и обусловлено размерами исследуемой территории, габаритами и расположением энергообъектов.

На участке № 1 (рис. 1) источниками ЭМП являются ЛЭП, аттракционы «Солнышко» и «Автодром» (аттракционы 1, 2) и распределительные щиты (ЩР).

На участке № 2 (рис. 2) – ЛЭП, аттракционы «Железная дорога», «Лебеди», «Карусель» (аттракционы 3, 4, 5), щиты распределительные (ЩР), комплектная трансформаторная подстанция (КТП).

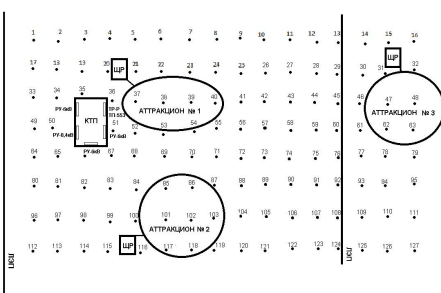
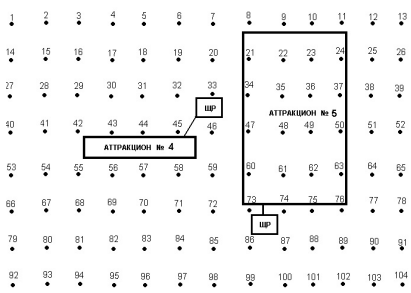


Рис. 1 Карта-план участка № 1 на территории парка культуры и отдыха Центрального района г. Барнаула.

Рис. 2. Карта-план участка № 2 на территории парка культуры и отдыха Центрального района г. Барнаула.

Комплектная трансформаторная подстанция предназначена для приема, преобразования и транзита электрической энергии трехфазного переменного тока напряжением 6–10 кВ, частотой 50 Гц [2] и состоит из нескольких объектов:

- силовой трансформатор (масляный), который через устройство ввода со стороны высшего напряжения (6 кВ.) подключается к кабельной высоковольтной линии ввода;
- РУ–распределительное устройство: три РУ–6 кВ и одно РУ–0,4 кВ;
- устройство, автоматически осуществляющее защиту и управление.

Каждый аттракцион оснащен щитом распределения (ЩР) необходимым для учета и распределения электроэнергии при напряжении 380/220 В трехфазного переменного тока частотой 50–60 Гц, а также для защиты отходящих линий при коротких замыканиях и перегрузках.

Результаты проведенных измерений и анализ электромагнитных полей на территории парка на выделенных участках № 1 и № 2 представлены в виде 2D-реконструкции на рисунках 3–6.

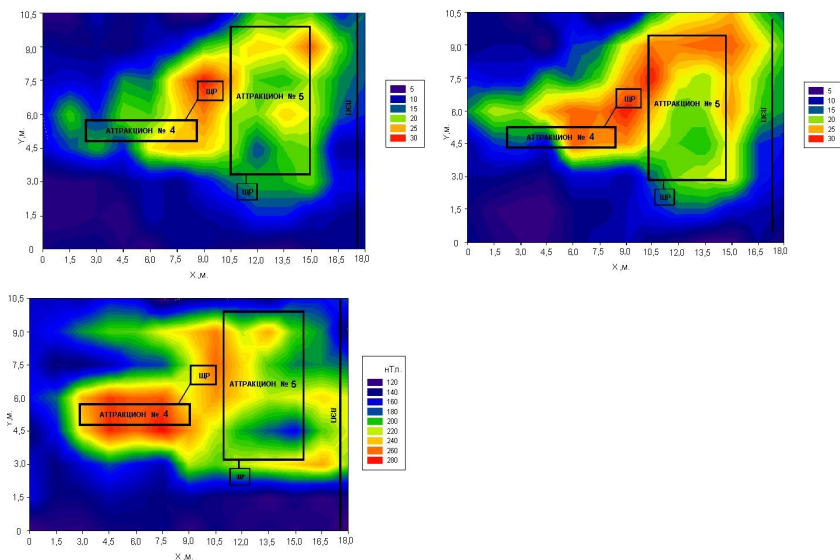
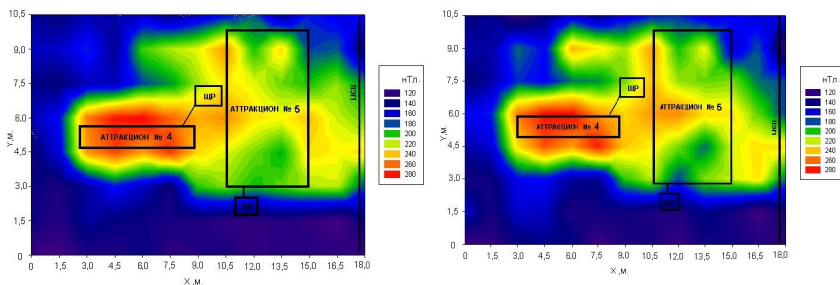


Рис. 3. Распределение магнитной индукции на участке №1 на высоте: а) 0,5 м, б) 1, 0 м; в) 1,8



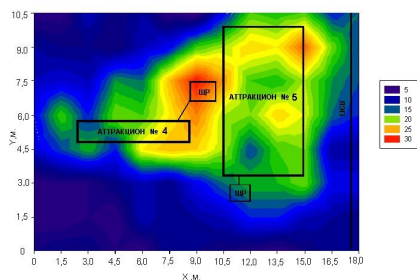


Рис. 4. Распределение напряженности электрического поля (В/м) на участке №1 на высоте: а) 0,5 м, б) 1, 0 м; в) 1,8 м

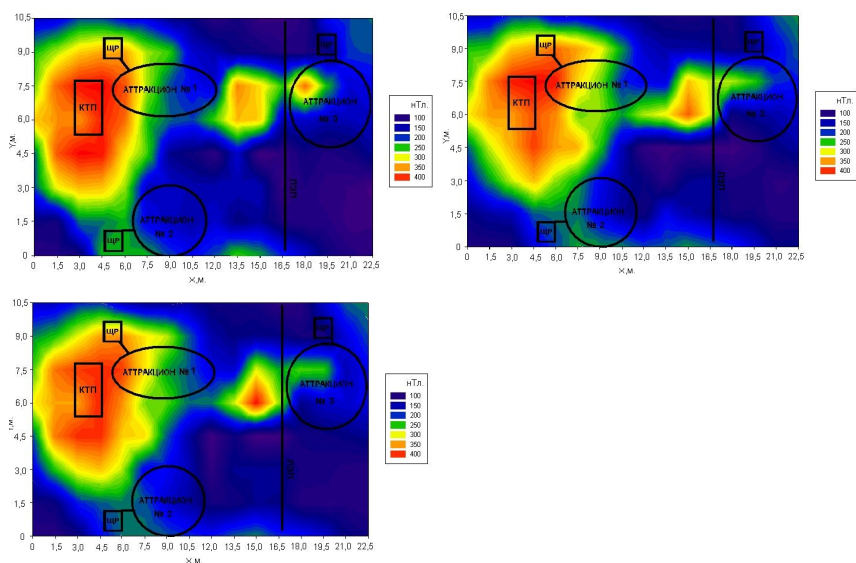


Рис. 5. Распределение магнитной индукции на участке № 2 на высоте: а) 0,5 м, б) 1, 0 м; в) 1,8 м

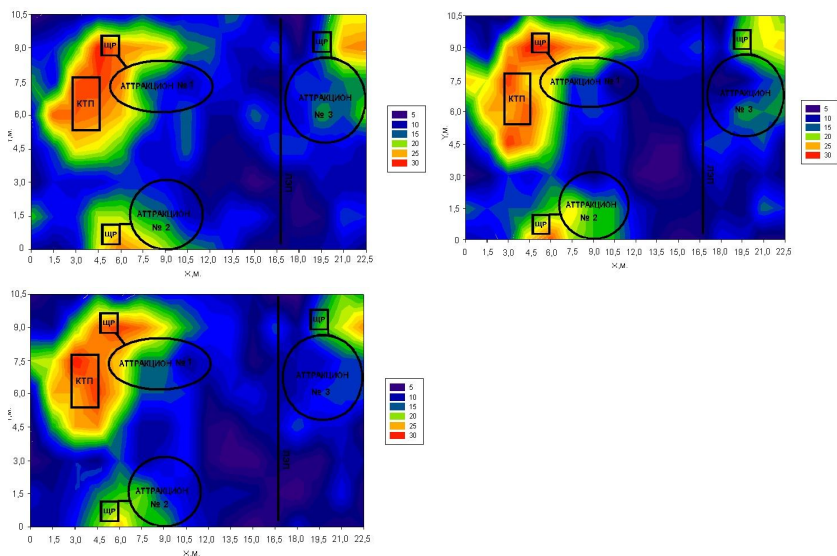


Рис. 6. Распределение напряженности электрического поля (В/м) на участке № 2 на высоте: а) 0,5 м, б) 1, 0 м; в) 1,8 м.

Основным источником ЭМП является трансформаторная подстанция. Общая картина распределения магнитной индукции с высотой существенно не меняется. Значение магнитной индукции максимально вблизи силового трансформатора, но не превышает ПДУ в 10 мкТл, установленный для переменного магнитного поля с частотой 50 Гц на селитебной территории [3, 4]. Увеличение индукции между аттракционами №1 и №3 может быть вызвано интерференцией волн. Из рисунков видно, что характер распределение напряженности поля меняется с высотой. Наибольшее значение напряженности поля наблюдается вблизи щита распределения аттракциона № 4.

Общая картина распределения напряженности электрического поля с высотой меняется не значительно. Максимальная напряженность во много раз меньше предельно допустимого уровня (предельно допустимая напряженность переменного электрического поля с частотой 50 Гц на селитебной территории составляет 1000В/м) [3, 4].

Графики зависимости напряженности электрического поля и магнитной индукции от расстояния до КТП в различных направлениях представлены на рис. 7–8.

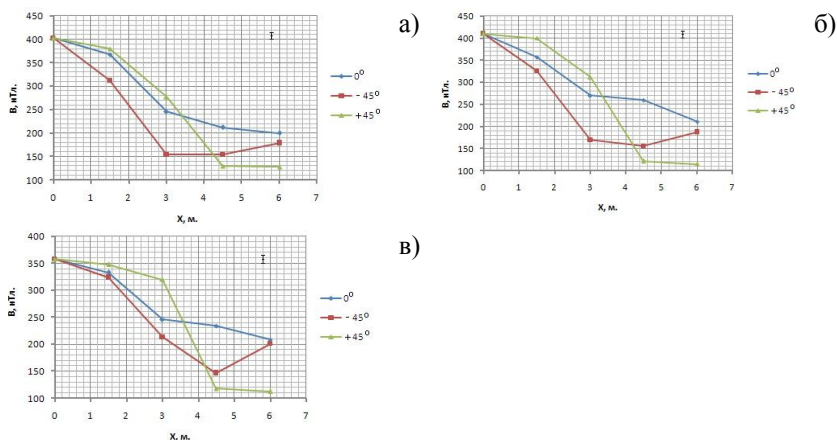


Рис. 7. График зависимости магнитной индукции от расстояния до КТП на высоте: а) 0,5 м, б) 1,0 м; в) 1,8 м.

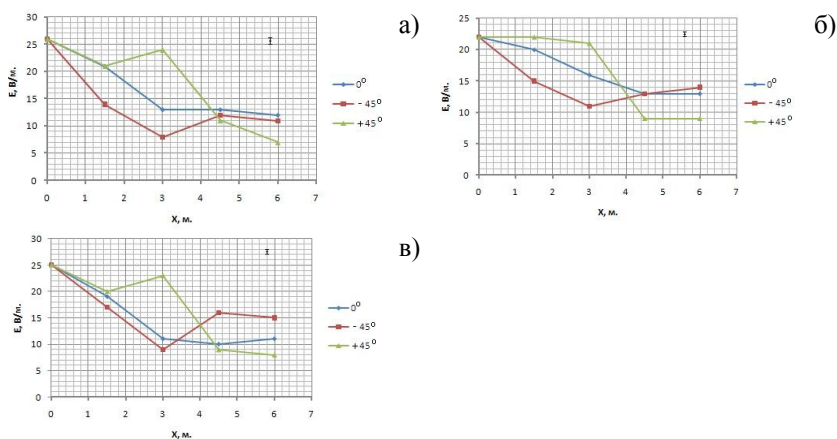


Рис. 8. График зависимости напряженности электрического поля от расстояния до КТП на высоте: а) 0,5 м, б) 1,0 м; в) 1,8 м.

Из рисунков видно, что электромагнитное поле от КТП распределено во всех направлениях практически равномерно, независимо от расстояния до Земли. При удалении от источника излучения на расстояние, порядка 6 метров, магнитная индукция уменьшается в 1,7 и более раз, напряженность электрического поля уменьшается в 1,5 раза.

По результатам исследований, были построены графики зависимости магнитной индукции и построены аналогичные графические зависимости параметров ЭМП от расстояния до точек с их минимальным значением, находящихся вдали от источников излучения для участка № 2, где за ноль бралась точка № 92 на карте-плане и участка № 1, где за ноль бралась точка № 104 на карте-плане.

Выявлено заметное увеличение магнитной индукции и напряженности электрического поля, по мере приближения к источникам излучения (аттракционам). Динамика изменения исследуемых параметров ЭМП с расстоянием до реперных объектов (ЛЭП, нулевых точек) на разных высотах, в пределах допускаемой погрешности, носит одинаковый характер.

Характер флуктуации напряженности электрического поля может быть связан с наличием на территории зеленых насаждений. Листья деревьев частично поглощает ЭМ излучение, это свойство используется для защиты населения от негативного влияния полей [5]. Из полученных результатов можно сделать вывод, что воздушные линии электропередач, не являются основными источниками электромагнитного загрязнения на территории парка.

Значения магнитной индукции для точек, находящихся в значительном удалении от источников излучения промышленной частоты, находящихся на территории парка, лежат в интервале 100–140 нТл, напряженности электрического поля – в интервале 6–9 В/м, что значительно меньше предельно допустимых значений.

Обобщая результаты исследований можно констатировать, что напряженность ЭП и магнитная индукция от источников излучения промышленной частоты, находящихся на территории парка, не превышает предельно допустимые уровни, установленные СанПиНом для селитебной территории, но следует также отметить, что воздушные ЛЭП и силовые трансформаторы, помимо ЭМП промышленной частоты (ПЧ), являются источниками высокочастотных полей.

Литература

1. Свиридова Е.Ю. Анализ проблемы совершенствования мониторинга низкочастотных электромагнитных полей на селитебных территориях //Приволжский научный вестник – 2013. – № 9(25). – С. 13–16;
2. Рожкова Л.Д. Электрооборудование станций и подстанций /Л.Д. Рожкова, В.С. Козулин. – М.: Энергоатомиздат, 1987. –648с.

3. Санитарно-защитные зоны и санитарная классификация предприятий сооружений и иных объектов (СанПиН 2.2.1/2.1.1.1200-03). – М.: Информ.-издат. центр Минздрава России, 2007. – 43с.;

4. СанПиН 2.1.2801-10 Изменения и дополнения № 1 к СанПиН 2.1.2.2645-10. Санитарно-эпидемиологические требования к условиям проживания в жилых зданиях и помещениях – М.: Минздрав России, 2010. – 7с.;

5. Свиридова Е.Ю. Исследование электромагнитных полей линий электропередач и рекомендации по снижению их негативного воздействия / Е.Ю. Свиридова, М.В. Графкина // Вестник БГТУ им. В.Г. Шухова. – 2010. – № 2. – С. 1–3.

ФРАКТАЛЬНАЯ РАЗМЕРНОСТЬ СИГНАЛОВ АКУСТИЧЕСКОЙ ЭМИССИИ ПРИ НАГРУЖЕНИИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВОВ*

Дмитриев А.А., Поляков В.В.

Алтайский государственный университет, г. Барнаул

E-mail: dmitriev@asu.ru

Введение

Современные методы акустико-эмиссионной диагностики деформационного поведения материалов построены на основе анализа информативных параметров регистрируемых сигналов акустической эмиссии. Эти параметры определяются физическими механизмами процессов пластической деформации и разрушения и отражают совместное действие различных источников акустической эмиссии. В зависимости от конкретных задач диагностики на практике могут применяться временные или частотные методы обработки сигнала. Использование этих методов позволяет идентифицировать амплитудные или частотно-временные особенности, которые проявляются в изменении регистрируемого сигнала при протекании тех или иных процессов [1-2]. Перспективным подходом к выделению из акустико-эмиссионного сигнала информативных параметров является его рассмотрение в виде фрактального объекта [3]. В этом случае в качестве характеристики акустической эмиссии выступает фрактальная размерность сигнала. Оценка фрактальных свойств позволяет сделать вывод об особенностях акустико-эмиссионного сигнала на каждом этапе нагружения материала. В настоящей работе на примере алюминий-магниевого сплава проводится расчет

фрактальной размерности сигнала акустической эмиссии, формирующейся при нагружении материала.

Материалы и эксперимент

Для проведения исследований в настоящей работе использовался материал из алюминиевого сплава АМг5М (Al – 94%, Mg – 4.58%, Mn – 0.68%, Si – 0.1%, Zn – 0.19% и 0.45% – другие примеси). Из данного материала были изготовлены плоские образцы с размерами прямоугольной рабочей части 5x15x50 мм. Проведение металлографических исследований показало, что материал имел равноосную зеренную микроструктуру со средним размером зерна 53 мкм (рис. 1).

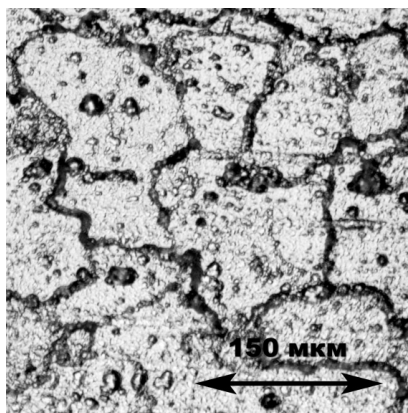


Рис. 1. Микроструктура алюминий-магниевого сплава.

Образцы подвергались испытаниям на статическое растяжение вплоть до разрушения с измерением относительной деформации ϵ и приложенного напряжения. Регистрация сигнала акустической эмиссии осуществлялась при помощи пьезоэлектрического датчика GT-301 с частотой дискретизации 2,5 МГц. Записанный сигнал после обработки системой аналого-цифрового преобразования представлял собой мгновенные значения напряжения акустической эмиссии U , пропорциональные напряжению с пьезоэлектрического датчика. Эти значения использовались для вычисления отношения «сигнал/шум» в логарифмическом масштабе в зависимости от относительного удлинения [4-5]. Типичные результаты измерений акустической эмиссии приведены на рис. 2. Экспериментальная кривая характеризует акустическую эмиссию различных стадиях пластической деформации, в том числе стадии прерывистой текучести.

Появление высокоамплитудных значений при высоких деформациях объясняется процессами предразрушения и разрушения образца [6].

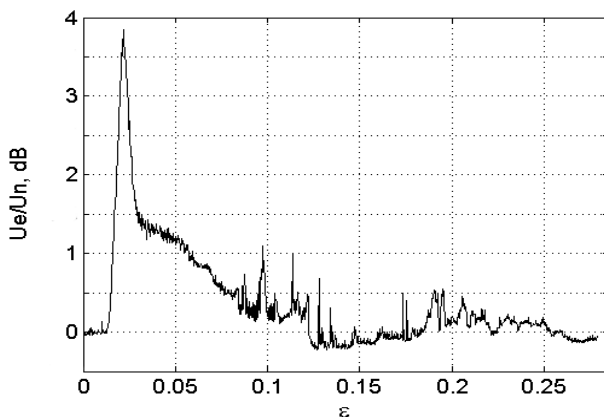


Рис. 2. Акустическая эмиссия алюминий – магниевого сплава.

Фрактальная обработка сигнала акустической эмиссии.

Понятие фрактальной размерности первоначально было введено для описания сложных геометрических объектов, для которых характерно явление самоподобия на различных масштабах [7]. Топологическая размерность для самоподобных структур не может быть выражена целочисленными значениями и заменяется фрактальной размерностью, принимающей дробные значения [1, 2]. Понятие фрактальной размерности далее было распространено на описание особенностей формы экспериментальных сигналов. В настоящей работе этот подход применен для оценки «изрезанности» сигнала акустической эмиссии, отражавшего в конечном счете сложную суперпозицию регистрировавшихся акустических сигналов от различных источников излучения.

При обработке экспериментальных данных весь сигнал акустической эмиссии разбивался на блоки равной длины, содержащие $\sim 10^7$ мгновенных значений сигнала. Длина блока соответствовала удлинению образца на 0.02 мм в процессе растяжения. Для каждого блока сигнала рассчитывалась фрактальная размерность. Вычисления проводились согласно выражению

$$D = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\ln(N_\varepsilon)}{\ln\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)} \quad (1)$$

где D – значение фрактальной размерности, $N(e)$ – число фрагментов акустического сигнала, определенных на масштабе подсчета e [8, 9]. Для практического применения выражения (1) при вычислении D на графическое изображение блока эмиссионного сигнала была нанесена масштабная сетка, размер ячейки сетки определялся параметром e . Далее производился подсчет фрагментов сигнала, попадавших в ячейки сетки. Вычисления повторялись для различных значений размеров масштабной сетки. Зависимость числа фрагментов от заданных масштабов подсчета имела степенной характер и представлялась в виде

$$N_e \sim e^{-D} \quad (2).$$

Для определения фрактальной размерности полученные значения N_e и e для зависимости (2) представлялись в логарифмическом масштабе. На рис. 3 показан пример полученной зависимости логарифма числа элементов сигнала N_e от масштаба разложения, определенного как логарифм $1/e$. Из рис. 3 видно, что полученные значения могут быть аппроксимированы линейной функцией, наклон соответствующей линии определяет значение фрактальной размерности D .

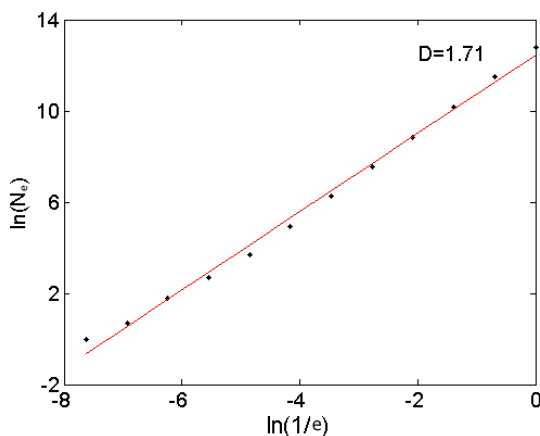


Рис. 3. Вычисление фрактальной размерности акустико-эмиссионного сигнала.

Аналогичные расчеты были проделаны для всех блоков сигнала акустической эмиссии. Рассчитанные значения фрактальной размерности представлено на рис. 4 в координатах «фрактальная размерность D – относительное удлинение ε ».

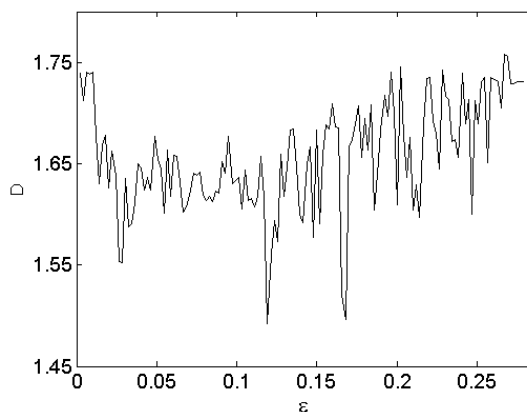


Рис. 4. Изменение фрактальной размерности сигнала акустической эмиссии при нагружении.

Из рис. 4 следует, что фрактальная размерность акустико-эмиссионного сигнала изменяется в процессе нагружения. Наблюдаемый максимум фрактальной размерности в начальной стадии деформационного упрочнения связан с регистрацией шумовой составляющей сигнала, создаваемого испытательной машиной. При дальнейшем растяжении образца генерируется сигнал акустической эмиссии, определяемый процессами локальной перестройки структуры материала и имеющий достаточно сложную форму. Значения фрактальной размерности, рассчитанные при росте деформации, в среднем увеличиваются, что указывает на возрастание «изрезанности» регистрируемого сигнала. Низкое значение фрактальной размерности для отдельных блоков соответствует акустической эмиссии, содержащей одиночные импульсы. Фрактальная размерность достигает максимума на стадиях предразрушения и разрушения образца, которые характеризуются сильными осцилляциями сигнала акустической эмиссии [10].

Заключение.

В работе предложен метод фрактальной обработки сигнала акустической эмиссии, заключающийся в вычисление фрактальной размерности для блоков акустико-эмиссионного сигнала, регистрировавшихся на различных стадиях деформационного упрочнения. Показано, что фрактальная размерность сигнала изменяется при увеличении деформации, что отражает изменение формы акустико-эмиссионного сигнала при нагружении материала.

**Статья подготовлена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №17-08-00914.*

Литература

1. Ferreira D.B.B., Da Silva R.R., Rebello J.M.A., Siqueira M.H.S. Failure mechanism characterisation in composite materials using spectral analysis and the wavelet transform of acoustic emission signals // Insight. — 2004. — Vol. 46, Iss. 5. — P. 282-289.
2. Loutas T.H., Kostopoulos V., Ramirez-Jimenez C., Pharaoh M. Damage evolution in center-holed glass/polyester composites under quasi-static loading using time/frequency analysis of acoustic emission monitored waveforms // Composites Science and Technology. — 2006. — Vol. 66, Iss. 10. — P. 1366-1375.
3. Kumar J., Ananthakrishna G. Modeling the complexity of acoustic emission during intermittent plastic deformation: Power laws and multifractal spectra // Physical Review. — 2018. — Vol. 97, Iss. 1. — P. 1-12.
4. Егоров, А.В. Применение методов акустической эмиссии к исследованию деформационного поведения структурно-неоднородных материалов: монография / А.В. Егоров, В.В. Поляков. — Барнаул, 2008
5. Поляков В.В., Егоров А.В., Салита Д.С., Колубаев Е.А. Физические методы диагностики сварных соединений в алюминиевых сплавах часть 2. Акустическая эмиссия // Известия Алтайского государственного университета. — 2015. — Т. 1, Вып. 85. — С. 50-54.
6. Дмитриев А.А., Поляков В.В., Лепендин А.А. Исследование пластической деформации алюминиевых сплавов с использованием вейвлет-преобразований сигналов акустической эмиссии // Письма о материалах. — 2018. — Т. 8, Вып. 1. — С. 33-36.

7. Лепендин А.А., Поляков В.В. Скейлинг характеристик акустической эмиссии при пластической деформации и разрушении // Журнал технической физики. 2014. Т. 84. № 7. С. 96-100.
8. Федер Е. Фракталы. — М.: Мир, 1991. — 254 с.
9. Божокин С.В., Паршин Д.А. Фракталы и мультифракталы. — Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2001. — 128 с.
10. Дмитриев А.А., Поляков В.В., Лепендин А.А. Исследование пластической деформации алюминиевых сплавов с использованием вейвлет-преобразований сигналов акустической эмиссии // Письма о материалах. 2018. Т. 8. Вып. 1. С. 33-36.

СТРУКТУРА ПОВЕРХНОСТНОГО РЕЛЬЕФА МЕДИ

Зими́на Е.С.¹, Демья́нов Б.Ф.²

¹*Алтайский государственный университет, г. Барнаул, Россия*

²*Алтайский государственный технический университет, г.*

Барнаул, Россия

E-mail: katena.zimina.95@mail.ru

Мир явлений, связанных с границей раздела фаз, настолько широк, что, пожалуй, трудно найти такие процессы, которые не были бы так или иначе связаны с химией поверхности. Серьезные экспериментальные и теоретические исследования в этой обширной области необходимы для понимания механизма атмосферных явлений, совершенствования технологии обработки материалов, получения сверхчистых поверхностей, синтеза новых более эффективных катализаторов, разработки высокоэффективных моющих и клеящих средств, антикоррозионных покрытий и т.д. Многие из перечисленных выше проблем имеют принципиальное значение, и их решением занимаются самые различные специалисты» [1].

Совокупность границ, разделяющих различные физические состояния, или фазы, называется поверхностью или границей раздела. Понятие "поверхность твердого тела" включает и границу раздела со всеми характерными для нее особенностями. Одной и той же поверхности обычно принадлежат атомы различных кристаллических (кристаллографических) плоскостей, характеризующихся различными кристаллографическими осями. Свойства каждой поверхности определяются не только присущим ей собственным порядком атомов, но и окружением, способным значительно влиять на ее характеристики. Таким образом, для описания свойств поверхности

необходим микроскопический подход. Границами обладают все твердые тела и жидкости. Существуют, естественно, границы раздела и между различными фазами: жидкость или твердое тело и газ (вакуум), твердое тело и твердое тело, твердое тело и жидкость, жидкость и жидкость. Подразумевая под поверхностью непрерывную границу раздела, мы вновь приходим к выводу о необходимости микроскопического подхода, поскольку иначе нельзя описать ряд систем, обладающих специфическими границами (например, дисперсных системы) [2].

Если кристалл имеет равновесную конфигурацию, то его поверхность его будет состоять из идеальных плоскостей только при абсолютном нуле температуры. При конечных температурах часть атомов покидает равновесные положения, и строение поверхности становится более сложным [3].

Совершенных упорядоченных поверхностей с полной трансляционной симметрией в реальности не существует. Любая реальная поверхность содержит определенное количество структурных дефектов. Обычно дефекты поверхности подразделяются в соответствии с их размерностью. Выделяют четыре вида дефектов:

1 Точечные (нульмерные), размеры которых не превышают одного или нескольких межатомных расстояний. К ним относятся вакансии, межузельные атомы, дефекты Френкеля и Шоттки, а также их антидефекты;

2 Линейные (одномерные), представляющие собой нарушение периодичности в одном измерении. К ним относятся дислокации, микротрещины;

3 Поверхностные (двумерные), к которым относятся границы зерен и двойников, дефекты упаковки, межфазные границы, стенки доменов, поверхность кристалла;

4 Объемные (трехмерные) – это микропустоты.

Коллективное действие поверхностных дефектов может кардинально менять структуру поверхности. Например, результатом формирования упорядоченного массива моноатомных ступеней может стать вицинальная поверхность, а огрубление или плавление поверхности можно рассматривать как процесс дефектообразования, в который вовлечены почти все атомы поверхности. Но даже в малых концентрациях дефекты могут играть решающую роль во многих процессах на поверхности, таких как адсорбция, поверхностная диффузия, химические реакции и рост тонких пленок [4].

Модель террас-ступеней-изломов описывает простой кубический кристалл, в котором каждый атом решётки представлен кубиком или сферой. Ниже представлена (рис. 1) модель террас-ступеней-изломов, показывающая типичные атомные положения и дефекты на поверхности (100) простого кубического кристалла [5].

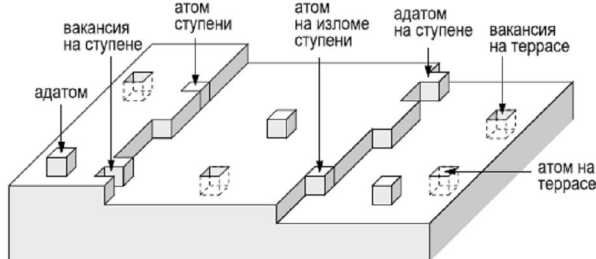


Рис. 1. Модель, показывающая типичные атомные положения и дефекты на поверхности (100) простого кубического кристалла.

Теперь рассмотрим эффекты полученные атомными ступенями. В качестве исходной поверхности возьмем низкоиндексную поверхность без ступеней, например, грань (100) простого кубического кристалла (рис. 2, а). Такие атомарно гладкие поверхности являются сингулярными поверхностями. Поверхности, которые образуют малый угол θ с сингулярной поверхностью, называются вицинальными поверхностями. Такие поверхности представлены террасами ближайшей сингулярной плоскости и моноатомными ступенями (рис. 2, б). Ширина террас определяется углом наклона. Если вицинальная поверхность разориентирована в двух направлениях, то ступени содержат регулярно повторяющиеся изломы (рис. 2, в).

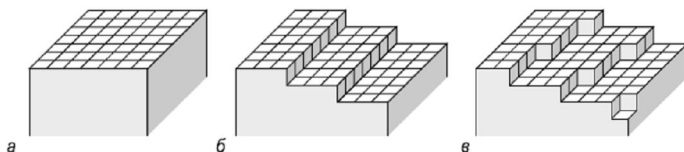


Рис. 2. Модель, а - поверхности (100) и наклонных поверхностей, разориентированных по отношению к поверхности (100) в б - одном; в - двух направлениях.

В работе исследовалась поверхность поликристаллической меди, подвергнутой высокотемпературному травлению при $T = 950^\circ\text{C}$ в течение 9 часов. Исследование проводилось методом оптической микроскопии [3] на металлографическом микроскопе Neophot-32 в

лаборатории контроля качества материалов и конструкций на базе кафедры общей и экспериментальной физики Алтайского государственного университета. В процессе нагрева происходит рекристаллизация меди. Медь приобретает равновесную структуру. Поверхность также образует равновесный рельеф.

Состояние равновесия поверхности характеризуется правильным расположением атомов. Чтобы убедиться, что система находится в равновесии было проведено измерение углов в тройных стыках и равноосность зерен.

На рис. 3 представлена гистограмма распределений углов в тройных стыках. На гистограмме N - количество исследуемых зерен, ϕ - угол в тройных стыках. На этой гистограмме можно увидеть, что большинство углов составляет приблизительно 120° . Это означает, что один из критериев позволяет утверждать, что система находится в равновесии.

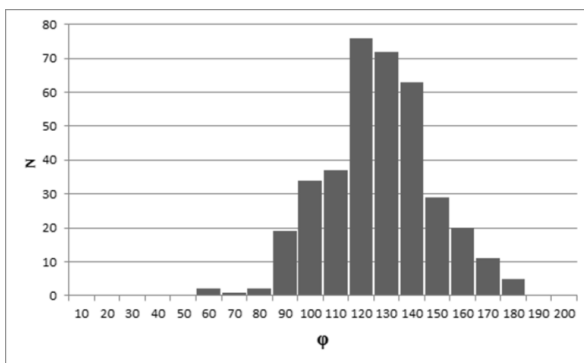


Рис. 3. Гистограмма распределения углов в тройных стыках

На рис. 4 представлена гистограмма распределения равноосности зерен. Также можно проследить за значением отклонения от равноосности $\Delta d/d_{cp}$ большинство зерен имеют маленькое отклонение приблизительно 10 %. Это свидетельствует о равновесности системы. Где N - количество исследуемых зерен, $\Delta d/d_{cp}$ – отклонение от равноосности.

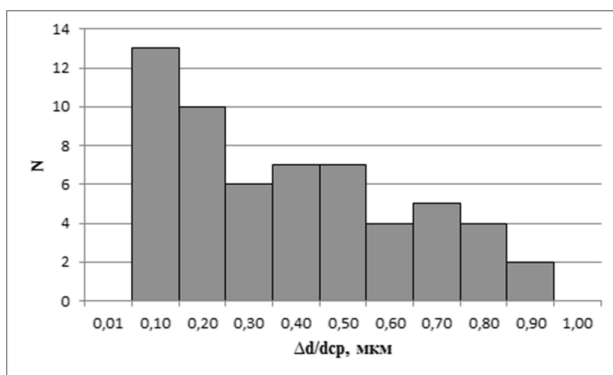


Рис. 4. Гистограммы распределения равномерности зерен

Поверхность меди после термического травления приведена на рисунке 5. Видно, что медь имеет поликристаллическую структуру. Выявились границы зерен и двойники. Границы зерен представляет собой тонкие линии, их травление связано с тем, что атомы меди, расположенные на границах слабее связями с другими атомами и легче испаряется при высоких температурах. На микроскопическом уровне границы зерен имеют форму канавок.

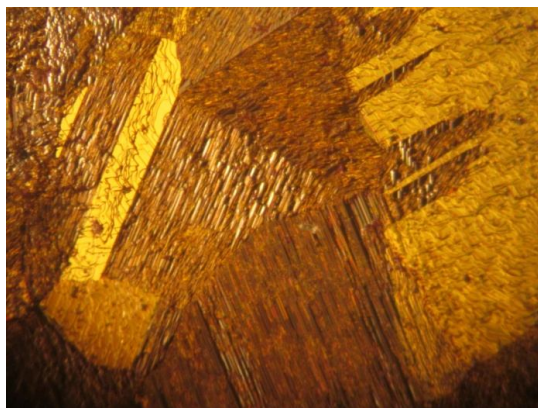


Рис. 5. Типичная структура меди после термического травления.

Поверхность большинства зерен в оптическом микроскопе выглядит как гладкая. На самом деле ее структура зависит от кристаллографической ориентации зерна и описывается атомной моделью террас – ступеней - изломов. Помимо гладких зерен нами были обнаружены зерна с хорошо различимым в оптическом

микроскопе рельефом. Это рельеф имеет масштаб в диапазоне микрометров и поэтому был назван макроскопическим рельефом.

Был проведен анализ типов структур поверхности после термического травления и выявлены наиболее часто встречающиеся структуры. Структуры рельефа поверхности приведены на рис. 6 и 7. Часто наблюдается рельеф в виде полос (рис. 6а) Полоски проходят через весь кристалл, расстояние между полосками составляет около 5 мкм. Характерным элементом рельефа являются угловая структура (рис. 6б). Угловые структуры образуют треугольник с углом 60° . Характерный размер треугольника равен 50 мкм. Угол 60° позволяет предположить, что угловые структуры образуются на поверхности зерен, кристаллографическая ориентация которых близка к плоскости с индексами Миллера (111).

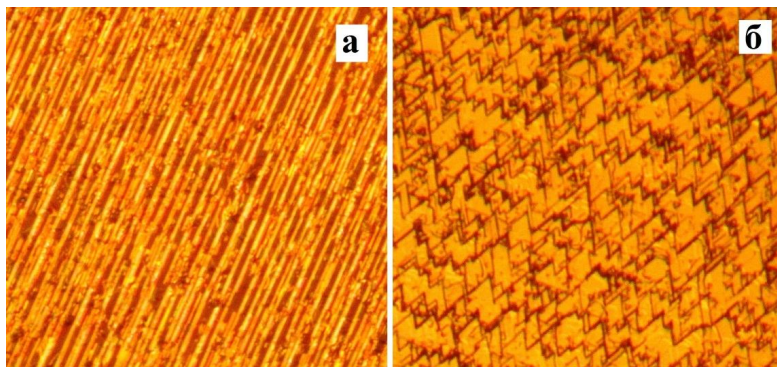


Рис. 6. Полосчатая (а) и угловая (б) структура поверхности меди.

Другой тип рельефа присутствующий в большом количестве зерен можно охарактеризовать как прямоугольные фигуры (рис. 7а). Ступеньки рельефа образуют углы 90° , такая структура может соответствовать кристаллографическим плоскостям с индексами Миллера (100), или (110). И четвертый тип рельефа – зернистая структура (рис. 7б). Зернистая структура может образовываться на кристаллографических плоскостях с большими индексами Миллера.

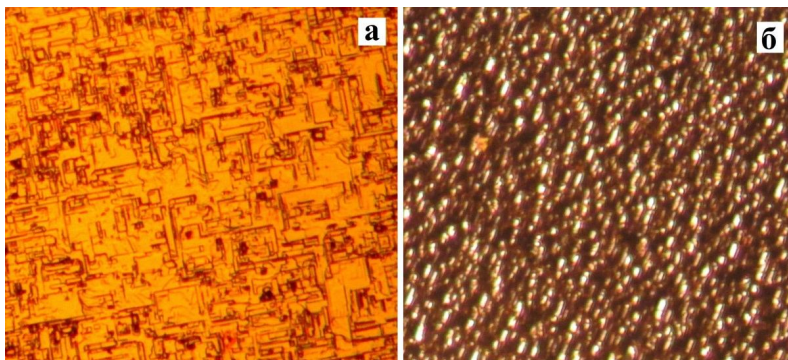


Рис. 7. Прямоугольная (а) и зернистая (б) структура поверхности меди.

Заключение

В ходе исследования поверхности меди после термического травления в вакууме можно сделать некоторые выводы.

1. Высокотемпературный отжиг меди при предплавильной температуре ($T=950^{\circ}\text{C}$) позволяет сформировать равновесную поверхность, структура которой зависит от ориентации монокристалла.

2. Обнаружено существование двух уровней организации рельефа: микроуровень, формирующий поверхность из атомных террас-ступеней-изломов и макроуровень с огранкой рельефа кристаллографическими плоскостями, фасетками.

3. Проведена классификация типов структур макрорельефа поверхности. Основными типами макрорельефа являются полосчатые, угловые, прямоугольные и зернистые структуры.

4. Измерен типичный масштаб макроструктур. Размер элемента полосчатых структур равен приблизительно 5 мкм, угловых и прямоугольных - 50 мкм.

Список литературы.

1 Иноуэ К., Китахара А., Косеки С., Мамамуси Р., Накаса С., Сома Х., Тамару К., Танака Х. К 20 Капиллярная химия: Пер. с японск./Под ред. К. Тамару. - М.: Мир, 1983. - 272 с.

2 Оура К., Лифшиц В. Г., Саранин А. А. Введение в физику поверхности / Под ред. В. И. Сергиенко. — М.: Наука, 2006. — 490 с.

3 Киселев В. Ф., Козлов С. Н., Зотеев А. В. Основы физики поверхности твердого тела. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1999. - 284 с.

4 Беккерт М., Клемм Х. Способы металлографического травления. Справочник. - М.: Metallurgia, 1988.- 400 с.

5 Аппельт Г. Введение в методы микроскопического исследования, М.:Медгиз, 1959.- 426 с.

МАГНИТНОЕ ПОЛЕ СТАЛИ X18H10T ПОСЛЕ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ ОБРАБОТКИ

Ваттимури Д. Никифоров А.Г.

Алтайский государственный технический университет, Барнаул

E-mail: alexnik0113@mail.ru

Сталь X18 H10T используется как конструкционный материал в ядерной энергетике и ускорительной технике. Жесткие условия эксплуатации определяют повышенные требования к таким материалам. В ряде работ установлена корреляция между эволюцией структуры при радиационном воздействии и изменением магнитных свойств. Таким образом, магнитный метод может быть использован для изучения внутренних напряжений и деформаций, влияющих на эксплуатационные свойства стали [1,2]. Исследуемая сталь относится к классу слабомагнитных нержавеющей сталей с аустенитной структурой. Целью работы является изучение структуры магнитного поля, возникающего после обработки материала электронным пучком. При взаимодействии электронного пучка с металлом образуется узкий и глубокий канал проплавления, в котором протекают газодинамические процессы, недостаточно изученные в настоящее время. Исследование микроструктуры зоны расплава показало наличие δ -феррита в виде дендритных кристаллов [3].

Образец для исследования с размерами 60×40×20 мм выполнен из литой заготовки. Мощность электронного луча 60кВт. Ускоряющее напряжение 60кВ. Ток электронного луча 500мА. Энергия электронов в пучке 2 МэВ. Глубина зоны проплавления 25 мм. Мощность, выделяемая на площади фокусного пятна 15кВт/мм². Остаточное давление в вакуумной камере установки 10⁻¹ Па. Скорость перемещения составляла 2 мм/с. При облучении образца была использована установка для электронно-лучевой сварки ИЯФ СО РАН. Подготовленный для исследования образец имел механически полированную поверхность (Рис1). Измерение магнитной индукции проводилась с помощью датчика Холла. Расстояние датчика от поверхности образца составляло 1мм, расстояние между точками, в которых измерялась индукция в плоскости образца 1мм Диапазон измерения ± 0.2 мТ, точность $\pm 6\%$ во всем диапазоне, разрешение 0.1 μ Т.



Рис. 1. Структура областей расплава.

Измерение магнитной индукции необлученного образца показало отсутствие остаточной намагниченности. Поверхность образца после облучения, для которой проводились измерение магнитной индукции, представлена на рисунке 1. Значение остаточной намагниченности изменялось от $+0.2$ до -0.15 мТл (Рис.2). Положительные значения индукции наблюдались в области зоны проплавления. Вне зоны проплавления значение индукции были отрицательными. Структура магнитного поля облученного образца показывает наличие двух максимумов положительных значений индукции, расположенных вдоль зоны расплава. Ориентация области положительных значений индукции обусловлена различием глубины областей проплавления (Рис.3.). Магнитное поле нижней плоскости образца инвертировано по отношению к полю верхней плоскости (Рис. 4.). Однако структура поля сохраняется (Рис. 5). Таким образом, магнитное поле подобно магниту, полюса которого ориентированы перпендикулярно зонам проплавления.

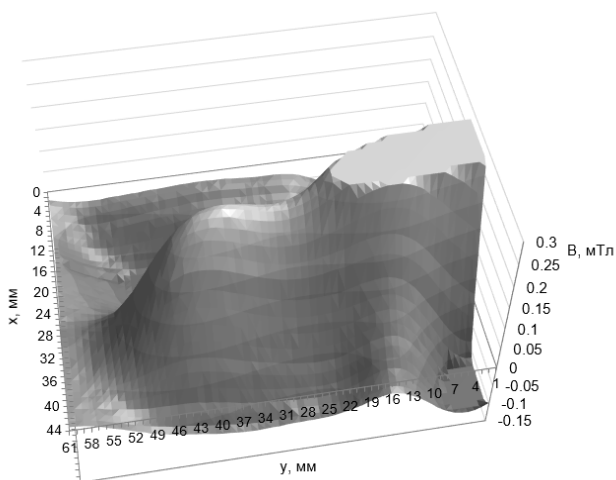


Рис.2. Структура магнитного поля верхней плоскости облученного образца.

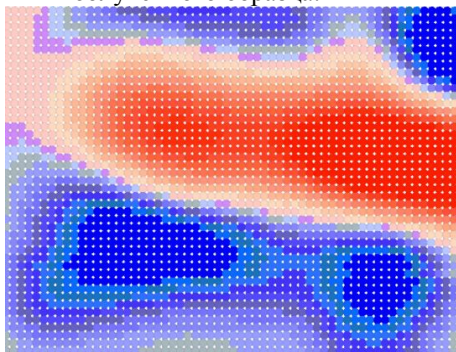


Рис.3. Проекция магнитного поля на плоскость образца.

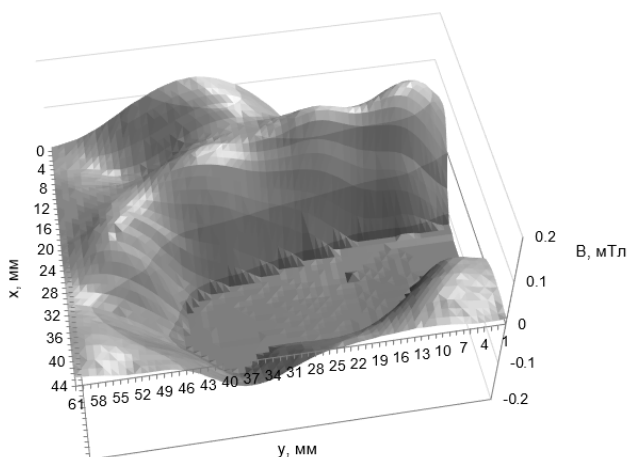


Рис.4. Структура магнитного поля нижней плоскости образца.

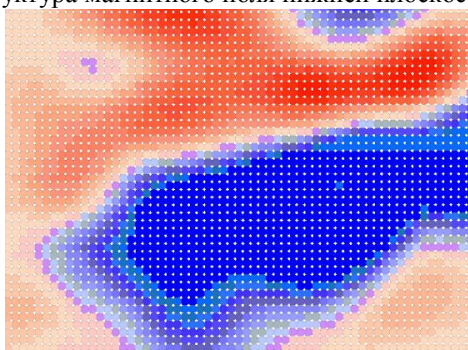


Рис. 5. Проекция магнитного поля на плоскость образца.

В работе проведено измерение индукции магнитного поля стали X18N10T после воздействия пучком электронов с энергией 2 МэВ. Результаты измерения показывают наличие остаточной намагнитченности в области расплава. Установлена структура магнитного поля. Наличие остаточной намагнитченности облученного образца могут быть обусловлены изменением структурного состояния изначально слабомагнитной стали, нарушением химического состава и, как следствие этого, образованием ферромагнитной фазы и процессами ее сегрегации.

Литература.

1. В.М. Ажажа, В.А. Десненко, Л.С. Ожигов, Ж.С. Ажажа, И.В. Свечкарев, Ф.В. Федорченко. Применение магнитных методов для исследования эволюции структуры в аустенитных нержавеющих сталях после длительной эксплуатации энергоблоках на АЭС // Вопросы атомной науки и техники. 2009. №4-2. *Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение* (94), с. 241-246.
2. В.Н. Воеводин, В.Ф. Зеленский, И.М. Неклюдов, О.В. Бородин. Особенности микроструктурных изменений в аустенитных и ферритных нержавеющих сталях при облучении // *ФММ*. 1996, т. 81, в. 3, с. 90-96.
3. Демьянов Б.Ф., Никифоров А.Г., Старостенко А.А., Цыганов А.С., Медведев А.М., Семенов Ю.И. Микроструктура зоны расплава в нержавеющей стали после электронно-лучевого воздействия // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*, 2017, т. 14, №4, с. 513-518.

ДВУХФАЗНОЕ РАСТЯЖЕНИЕ УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКИ

Семенов А.С.¹, Корзникова Е.А.², Дмитриев С.В.², Evazzade I.³,
Shahree S.G.³

¹ *Мирнинский политехнический институт (филиал) Северо-Восточного федерального университета, г. Мирный, Россия*

² *Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа, Россия*

³ *Department of Physics, Faculty of Science, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad, Iran*

E-mail: elena.a.korznikova@gmail.com

Аннотация

Гетероструктуры, состоящие из разнородных двумерных наноматериалов, могут обладать нетривиальными физико-механическими свойствами, перспективными для многих применений. Интересно, что в ряде случаев удается создавать гетероструктуры, состоящие из слабо и сильно растянутых доменов, имеющих одинаковый химический состав, как это было продемонстрировано для некоторых полимерных цепочек, ДНК и интерметаллических нановолокон, демонстрирующих эффект двухфазного растяжения. Эти материалы при относительно больших растягивающих усилиях расщепляются на домены с меньшей и большей деформацией растяжения. В пределах двухфазной области деформирования средняя

деформация образца увеличивается при постоянной силе растяжения, при росте домена с большей деформацией за счет домена с меньшей деформацией. В данной работе изучено явление двухфазного растяжения углеродной нанотрубки методом молекулярно-динамического моделирования. Установлено, что кривые нагрузки-разгрузки при осевом растяжении проявляют гистерезисное поведение за счет диссипации энергии при зарождении и движении доменных стенок. Показано, что в режиме двухфазного растяжения углеродная нанотрубка представляет собой частный случай гетероструктуры, свойствами которой можно управлять, изменяя размер доменов каждой фазы путем приложения упругой деформации.

Введение

Двумерные (2D) наноматериалы, благодаря сочетанию их необычных механических и физических свойств, привлекли большое внимание исследователей в последнее десятилетие^{1,2}. Наиболее исследованным материалом бесспорно является графен³⁻⁷, однако в настоящее время известно более 700 новых двумерных материалов, свойства которых зачастую превосходят монослой углерода. Сочетание разнородных 2D материалов в различных гетероструктурах – это еще один способ повышения их свойств и, как следствие, новые возможности их применений. Такие гетероструктуры могут быть получены различными способами, в том числе, посредством химической модификации, частичной гидрогенизации графена, путем сборки многослойных гетероструктур с помощью слабых сил Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий⁸⁻¹⁰ и другими путями.

Еще одной особенностью материалов с пониженной размерностью является их способность поддерживать существование двух фаз в процессе деформации, что проявляется в наблюдении гистерезиса на кривой нагрузка-разгрузка. В частности, это явление наблюдалось в нановолокнах^{11,12}, ДНК¹³, нанолентах графена¹⁴. Деформация таких объектов связана с расщеплением структуры на домены с большей и меньшей степенью упругой деформации. Такое сосуществование доменов с разной степенью деформации возможно потому, что зависимость потенциальной энергии P от деформации ϵ при растяжении отдельного структурного элемента (одной трансляционной ячейки материала) имеет область выпуклости (Рис.1).

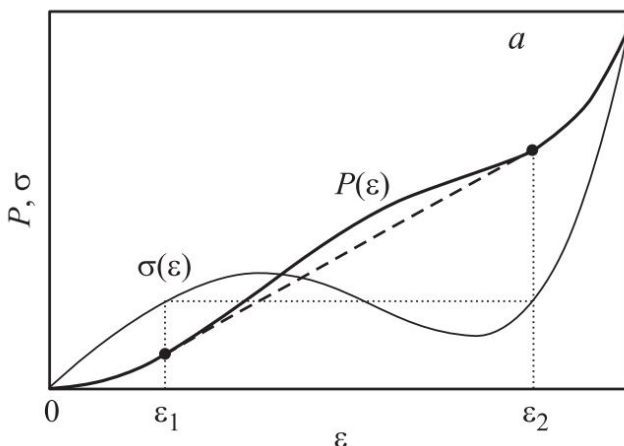


Рис. 1. Схематическое представление зависимости плотности потенциальной энергии P и напряжения $\sigma = dP/d\epsilon$ от деформации для мономера молекулы ДНК¹³. Отметим наличие области выпуклости кривой на участке деформации от $\square_1$ до $\square_2$.

Поскольку наноматериалы, обладающие необычными (аномальными) свойствами, могут найти новые приложения, их изучение представляется интересным и важным. Данная работа посвящена исследованию явления двухфазного растяжения углеродных нанотрубок методом молекулярной динамики.

Описание модели и полученные результаты

Для моделирования одноосного растяжения одностенных углеродных нанотрубок использовался межатомный потенциал AIREBO интегрированный в симулятор молекулярной динамики LAMMPS. Структура углеродной нанотрубки определяется двумерной элементарной ячейкой, определяемой хиральным вектором C ,

$$C = n \cdot a_1 + m \cdot a_2,$$

где a_1 и a_2 - единичные векторы ячейки, и n и m - целые числа. Построенная таким образом нанотрубка называется (n,m) нанотрубкой. В нашем исследовании мы рассматриваем трубки с ориентацией в направлении зигзаг с хиральностью $(n,0)$, где $n = 6, 12$ и 24 , как показано схематически на рисунке 2 а. Исследовались нанотрубки длиной 80 элементарных ячеек, каждая из которых содержит 2 $(n+m)$ атомов углерода. Положения атомов показанных на рис. 2 красным цветом, зафиксировано и контролируется прилагаемой деформацией. Нанотрубка подвергается квазистатическому растяжению вдоль оси X

путем поэтапного увеличения (уменьшения) усредненной осевой деформации ε_{xx} с последующей релаксацией структуры после каждого приращения. Шаг деформации равен $\Delta\varepsilon_{xx} = 0,01$. В процессе растяжения производилось измерение мембранного усилия и потенциальной энергии системы.

На рисунке 2 (b-d) показана структура нанотрубки в процессе одноосного растяжения. Известно, что упругая одноосная деформация графена реализуется за счет двух основных механизмов: изменение валентных углов и растяжение межатомных связей. Ввиду того, что для изменения длины высокоэнергетической ковалентной связи требуется приложить значительное количество энергии, более легким механизмом является изменение валентных углов, что и видно из рисунка 2 (b-d). При этом можно отметить, что деформация происходит неоднородно и в кристаллической решетке можно выделить несколько доменов с различной степенью упругой деформации. При этом увеличение степени деформации ε_{xx} приводит в первую очередь к увеличению продольного размера доменов, которые характеризуются большей степенью деформации. При этом потенциальная энергия системы демонстрирует монотонный линейный рост по мере растяжения нанотрубки (Рис. 3 а). На зависимости мембранной силы F от деформации при нагрузке можно отметить характерные пики, соответствующие объединению нескольких доменов в один. При этом подобное поведение отсутствует на кривой разгрузки, что свидетельствует о том, что этот процесс не сопровождается фазовыми переходами.

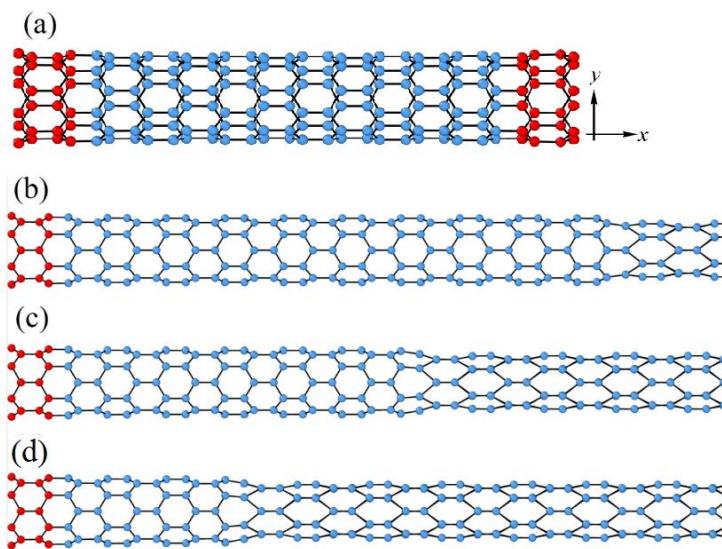


Рис. 2. (а) Структура углеродной нанотрубки 80x12 ячеек. Положения атомов, выделенных красным цветом, зафиксированы и изменяются в соответствии с прилагаемой деформацией ε_{xx} . (b)-(d) движение доменной стенки в процессе осевого растяжения в направлении оси X . Видно, что домен с большей осевой деформацией растяжения растет за счет того, что доменная стенка движется справа налево.

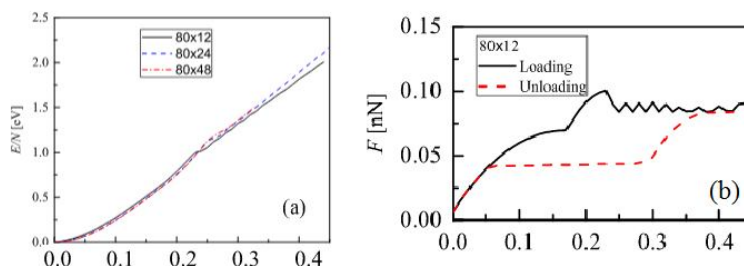


Рисунок 3. (а) Потенциальная энергия на атом в зависимости от осредненной деформации ε_{xx} нанотрубок различного диаметра. (b) Мембранная сила F как функция осредненной деформации ε_{xx} нанотрубки размером 80x12 ячеек при нагружении (черная сплошная линия) и разгрузке (красная пунктирная линия).

Выводы

Методом молекулярной динамики исследован эффект двухфазного растяжения углеродных нанотрубок, который заключается в том, что изменение размеров объекта происходит неоднородно путем роста доменов с большей осевой деформацией за счет поглощения доменов с меньшей деформацией. При разгрузке аналогичного эффекта не наблюдается.

Исследование двумерных материалов, поддерживающих двухфазное растяжение, способствует разработке фундаментальных основ новых функциональных гетероструктур. Доли разнагруженных доменов могут контролироваться уровнем упругой деформации, позволяя управлять физико-механическими свойствами гетероструктур.

Благодарности

Работа С.А.С. была поддержана грантом Российского научного фонда № 18-72-00006 (молекулярно-динамические расчеты). К.Е.А. выражает признательность фонду РФФИ, грант 18-32-20158 (обсуждение результатов моделирования, написание статьи). Д.С.В. благодарит грант РНФ 14-13-00982 (постановка задачи, обсуждение результатов моделирования).

Литература

1. Akinwande, D. *et al.* A review on mechanics and mechanical properties of 2D materials—Graphene and beyond. *Extreme Mechanics Letters* **13**, 42–77 (2017).
2. Kang, J. *et al.* Graphene and beyond-graphene 2D crystals for next-generation green electronics. in (eds. George, T., Islam, M. S. & Dutta, A. K.) 908305 (2014). doi:10.1117/12.2051198
3. Geim, A. K. & Novoselov, K. S. The rise of graphene. *Nature Materials* **6**, 183 (2007).
4. Dmitriev, S. V., Baimova, J. A., Korznikova, E. A. & Chetverikov, A. P. Nonlinear Excitations in Graphene and Other Carbon Nano-Polymorphs. in *Nonlinear Systems, Vol. 2* (eds. Archilla, J. F. R., Palmero, F., Lemos, M. C., Sánchez-Rey, B. & Casado-Pascual, J.) 175–195 (Springer International Publishing, 2018). doi:10.1007/978-3-319-72218-4_7
5. Korznikova, E. A. & Dmitriev, S. V. Moving wrinkle in graphene nanoribbons. *Journal of Physics D: Applied Physics* **47**, 345307 (2014).
6. Korznikova, E. A. *et al.* Delocalized Nonlinear Vibrational Modes in Graphene: Second Harmonic Generation and Negative Pressure. *physica status solidi (b)* 1800061 (2018). doi:10.1002/pssb.201800061

7. Korznikova, E. A., Baimova, J. A. & Dmitriev, S. V. Effect of strain on gap discrete breathers at the edge of armchair graphene nanoribbons. *EPL (Europhysics Letters)* **102**, 60004 (2013).
8. Geim, A. K. & Grigorieva, I. V. Van der Waals heterostructures. *Nature* **499**, 419–425 (2013).
9. Kistanov, A. A. *et al.* Effects of substrate and environmental adsorbates on the electronic properties and structural stability of antimonene. *Journal of Materials Science* **53**, 15559–15568 (2018).
10. Kistanov, A. A. *et al.* Effects of substrate and environmental adsorbates on the electronic properties and structural stability of antimonene. *Journal of Materials Science* (2018). doi:10.1007/s10853-018-2709-2
11. Bukreeva, K. A., Babicheva, R. I., Dmitriev, S. V., Zhou, K. & Mulyukov, R. R. Inhomogeneous elastic deformation of nanofilms and nanowires of NiAl and FeAl alloys. *JETP Letters* **98**, 91–95 (2013).
12. Bukreeva, K. A. *et al.* Effect of temperature on inhomogeneous elastic deformation and negative stiffness of NiAl and FeAl alloy nanofilms. *Physics of the Solid State* **56**, 1157–1162 (2014).
13. Savin, A. V., Kikot, I. P., Mazo, M. A. & Onufriev, A. V. Two-phase stretching of molecular chains. *Proceedings of the National Academy of Sciences* **110**, 2816–2821 (2013).
14. Evazzade, I. *et al.* Graphene nanoribbon as an elastic damper. *Nanotechnology* **29**, 215704 (2018).

УСТОЙЧИВОСТЬ ДЕЛОКАЛИЗОВАННОЙ НЕЛИНЕЙНОЙ МОДЫ В РЕШЕТКЕ ГРАФЕНА В ПРИСУТСТВИИ НОРМАЛЬНЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ

Семенова М.Н.¹, Абдуллина Д.У.², Семенов А.С.¹, Корзникова Е.А.³, Дмитриев С.В.³

¹ Мирнинский политехнический институт (филиал) Северо-Восточный федеральный университет, г. Мирный, Россия

² Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

³ Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа, Россия

E-mail: elena.a.korznikova@gmail.com

Аннотация

Все ангармонические эффекты в кристаллических решетках можно разделить на локализованные и делокализованные. При этом детальный анализ нелинейной динамики решетки показывает что

зачастую два этих типа мод тесно взаимосвязаны. Делокализованные нелинейные моды являются точными решениями уравнений движения, которые определяются исключительно типом симметрии решетки, не зависят от вида межатомного потенциала взаимодействия и амплитуды колебаний атомов. В случае потери устойчивости эти моды могут распадаться с образованием локализованных колебательных мод концентрирующих значительную часть энергии решетки. В данной работе рассмотрена устойчивость одной из делокализованных мод в решетке графена в присутствии колебаний нормальных к плоскости решетки. В качестве критерия потери устойчивости было принято отклонение положения атомов от паттерна моды в процессе колебаний. Установлено, что увеличение значения данного отклонения с течением времени изменяется по экспоненциальному закону, при этом в первую очередь неустойчивость проявляется в направлении нормали к плоскости листа.

Введение

Графен - двумерный материал, электронные свойства которого впервые исследовали в 2004г. Гейм и Новоселов [1]. Ряд его уникальных свойств стал предметом изучения большого числа исследователей по всему миру [2,3]. Помимо необычных физических, механических и других свойств интересным объектом для изучения является также нелинейная динамика данного материала. Ее особенности связаны прежде всего с низкой размерностью рассматриваемого материала. Ранее было показано, что растянутый графен может поддерживать локализованные колебания высокой амплитуды – дискретные бризеры (ДБ) [4,5], коотрые в настоящий момент исследуются во многих кристаллических решетках [6–9]. Растяжение в данном случае необходимо для снижения симметрии решетки и образования щели в фононном спектре, который в недеформированном графене является бесщелевым [3]. При этом важно отметить, что щель в фононном спектре появляется лишь при растяжении вдоль направления «кресло». В случае расположения ДБ на краю наноленты графена он локализован на 4 атомах в пределах одной гексагональной ячейки, атомы при этом колеблются в противофазе. ДБ также могут располагаться далеко от краев листа и при этом они локализованы на двух атомах, также колеблющихся в противофазе. Подобны объекты могут существовать как по отдельности так и формировать кластеры. Еще одна разновидность ДБ в графене была описана в работах [10,11]. В данном случае колебания ДБ направлены в плоскости нормальной к листу графена. Подобный

тип динамического дефекта наблюдался в недеформированном листе графена, что связано со слабым взаимодействием XU и Z фононов [10,11]. Одним из способов получения таких ДБ является наложение функции локализации на делокализованную нелинейную моду (ДНМ) [11]. ДНМ которые представляют собой определенный класс делокализованных ангармонических колебаний в системах с дискретной симметрией. Впервые подобные объекты были получены и описаны Г.М. Чечиным [12]. Для описания данного явления также часто используется термин «одномерные буши», обусловленное тем фактом, что движение атомов в рамках данного паттерна может быть описано одним уравнением движения. Было строго математически доказано, что для гексагональной симметрии решетки, к которой принадлежит графен существуют 4 одномерные ДНМ (Рис.1), 14 двумерных и одна трехмерная мода [13]. Ранее на примере гексагональной решетки с потенциалом взаимодействия Морзе было показано, что существование данных мод нестабильно, что проявляется в виде модуляционной неустойчивости [14]. При этом сценарии проявления неустойчивости в значительной степени зависит от характера амплитудно-частотной зависимости ДНМ и ее расположения относительно фононного спектра кристалла. В данной работе была поставлена задача исследовать модуляционную неустойчивость одной из ДНМ в решетке графена

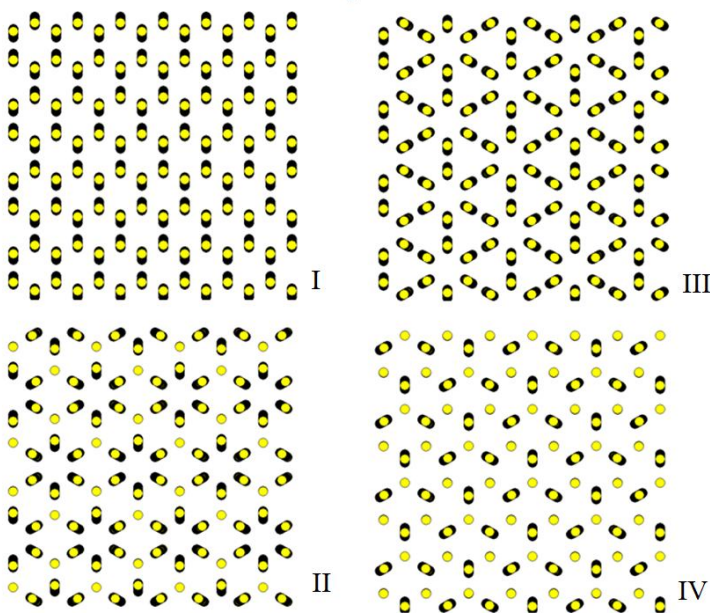


Рис. 1. Стробоскопическая картина движения атомов в паттернах четырех одномерных ДВМ в двумерной гексагональной решетке.

Описание модели и деталей компьютерного эксперимента

Молекулярно-динамические расчеты проводились с использованием оригинального программного продукта, разработанного с использованием алгоритмического языка C++. Прimitivesкая ячейка графена, содержит два атома, каждый из которых имеет три степени свободы – компоненты вектора смещения. Ось X совпадает с направлением «зигзаг», а ось y - с направлением «кресло». Взаимодействие атомов углерода описывалось потенциалом разработанным А.В. Савиным [15], разработанного с использованием стандартного набора межатомных потенциалов и учитывающим влияние деформации валентных связей, валентных и торсионных углов на энергию системы. Данный потенциал был успешно апробирован для решения целого ряда проблем в углеродных структурах [4,13,16,17].

Накладывались периодические граничные условия вдоль обоих координатных направлений. Использовался NVE ансамбль (неизменное число частиц, постоянный объем и энергия системы). Численное решение уравнений движения Ньютона проводилось

методом Штормера шестого порядка точности с шагом интегрирования $\Delta t = 0.0005$.

В работе рассматривалась стабильность колебаний ДНМ IV показанной на Рис.1. Потеря стабильности оценивалась как отклонение движения атомов от заданного паттерна в плоскости листа XY и в направлении нормали к плоскости листа Z.

Результаты и обсуждение

В работе рассматривалась динамика изменения положения атомов в процессе реализации ДНМ IV (Рис.1). В начальный момент времени возмущение во всех направлениях имело порядок 10^{-18} , обусловленное точностью записи координат атомов в процессе расчетов. На Рис. 2 (а) показана зависимость смещения атома от заданного паттерна движения в плоскости листа (Δx) и в направлении нормали к плоскости листа (Δz) от времени счета. Важно отметить, что ось ординат представлена в логарифмическом масштабе. Величины смещения Δx и Δz рассчитывались как максимальные смещения атомов в решетке в каждый момент времени. Как видно из этого рисунка, на начальном этапе движения колебания как в плоскости XY, так и в направлении Z имеют стабильную малую величину, однако с течением времени эти компоненты смещения нарастают от нулевого значения за счёт неустойчивости рассматриваемой ДНМ. Приблизительно с момента времени $t=2$ начинается монотонный экспоненциальный рост смещения Δz . Ввиду того, что в представленных координатах функция зависимости $\Delta z(t)$ является линейной, она может быть аппроксимирована полиномом первой степени, как показано на рис. 2 (а). Угол наклона данной линии тренда к оси абсцисс был обозначен как α . Зависимость величины угла α от амплитуды моды показана на Рис. 2 (б). Зависимость $\Delta x(t)$ также является монотонной функцией, на которой имеется точка перегиба в области $t=7$. В интервале $t=0-7$ наблюдается незначительный рост значения Δx , при $t>7$ линейный характер зависимости в логарифмических координатах сохраняется, однако увеличивается скорость распространения неустойчивости в плоскости XY. По аналогии с зависимостью $\Delta z(t)$ была произведена оценка значения угла наклона данной зависимости к оси абсцисс. Данный угол был обозначен как β . На Рис. 2 (б) показана зависимость углов α и 2β от амплитуды ДНМ A . Видно, что в исследованном интервале амплитуд данные графики совпадают. Их линейный рост говорит о сокращении времени стабильного существования ДНМ в рассматриваемой структуре графена по мере роста амплитуды данной моды.

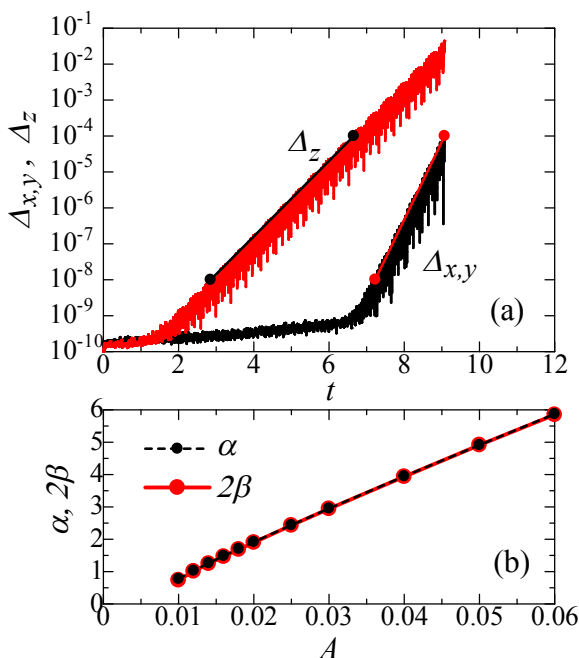


Рис. 2. (a) Зависимость максимального смещения атома от заданного паттерна движения в плоскости листа (Δ_{xy}) и в направлении нормали к плоскости листа (Δ_z) от времени моделирования; (b) зависимость α и 2β от амплитуды моды A , где α и β - угол наклона зависимости Δ_{xy} и Δ_z к оси X на (a) соответственно.

Выводы

В работе проведено моделирование устойчивости одной из четырех однокомпонентных ДНМ в решетке графена в присутствии нормальных возмущений. Произведена оценка неустойчивости в плоскости листа XY и в направлении Z , нормальном к плоскости листа. Установлено, что неустойчивость в обоих случаях развивается по экспоненциальному закону, при этом в направлении Z она начинает развиваться раньше. При увеличении амплитуды ДНМ неустойчивость моды также растет как в плоскости так и в перпендикулярном направлении. При этом графики зависимости скорости распространения неустойчивости из плоскости $\alpha(A)$ совпадает с аналогичной зависимостью в плоскости с коэффициентом $2\beta(A)$. Это

свидетельствует о том, что ДНМ являются неустойчивыми в первую очередь в отношении возмущений в плоскости нормали и о том, что возмущения в обоих направлениях жестко связаны между собой.

В дальнейшем планируется повторить описанный комплекс работ для трех оставшихся одномерных ДНМ в решетке графена для изучения сценария развития их неустойчивости.

Благодарности

Корзникова Е.А. благодарит грант РФФИ 18-32-20158 (написание статьи). Работа Семенова А.С. была поддержана грантом Российского научного фонда № 18-72-00006 (молекулярно-динамические расчеты). Дмитриев С.В. благодарит грант РНФ 14-13-00982 (постановка задачи, обсуждение результатов моделирования).

Список литературы

1. Geim A.K., Novoselov K.S. The rise of graphene // *Nature Materials*. 2007. Vol. 6. P. 183.
2. Akinwande D. et al. A review on mechanics and mechanical properties of 2D materials—Graphene and beyond // *Extreme Mechanics Letters*. 2017. Vol. 13. P. 42–77.
3. Bao Q., Loh K.P. Graphene Photonics, Plasmonics, and Broadband Optoelectronic Devices // *ACS Nano*. 2012. Vol. 6, № 5. P. 3677–3694.
4. Korznikova E.A. et al. Discrete breather on the edge of the graphene sheet with the armchair orientation // *JETP Letters*. 2012. Vol. 96, № 4. P. 222–226.
5. Korznikova E.A., Baimova J.A., Dmitriev S.V. Effect of strain on gap discrete breathers at the edge of armchair graphene nanoribbons // *EPL (Europhysics Letters)*. 2013. Vol. 102, № 6. P. 60004.
6. Korznikova E.A. et al. The reason for existence of discrete breathers in 2D and 3D Morse crystals // *Letters on Materials*. 2016. Vol. 6, № 3. P. 221–226.
7. Murzaev R.T. et al. Discrete breathers in alpha-uranium // *The European Physical Journal B*. 2016. Vol. 89, № 7.
8. Barani E. et al. Gap discrete breathers in strained boron nitride // *Physics Letters A*. 2017. Vol. 381, № 41. P. 3553–3557.
9. Korznikova E.A. et al. Highly symmetric discrete breather in a two-dimensional Morse crystal // *JETP Letters*. 2016. Vol. 103, № 4. P. 277–281.
10. Hizhnyakov V., Klopov M., Shelkan A. Transverse intrinsic localized modes in monatomic chain and in graphene // *Physics Letters A*. 2016. Vol. 380, № 9–10. P. 1075–1081.

11. Barani E. et al. Transverse discrete breathers in unstrained graphene // European Physical Journal B. 2017. Vol. 90, № 3.
12. Chechin G.M., Sakhnenko V.P. Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. Exact results // Physica D: Nonlinear Phenomena. 1998. Vol. 117, № 1–4. P. 43–76.
13. E. A. Korznikova, S. A. Shcherbinin, D. S. Ryabov, G. M. Chechin, E. G. Ekomasov, E. G. Soboleva, E. Barani, K. Zhou, S. V. Dmitriev. Delocalized vibrational modes in graphene: second harmonic generation and negative pressure. Physica status solidi, in press.
14. Korznikova E.A. et al. Instability of vibrational modes in hexagonal lattice // The European Physical Journal B. 2017. Vol. 90, № 2.
15. Savin A.V., Kivshar Y.S. Surface solitons at the edges of graphene nanoribbons // EPL (Europhysics Letters). 2010. Vol. 89, № 4. P. 46001.
16. Dmitriev S.V. et al. Nonlinear Excitations in Graphene and Other Carbon Nano-Polymorphs // Nonlinear Systems, Vol. 2 / ed. Archilla J.F.R. et al. Cham: Springer International Publishing, 2018. P. 175–195.
17. Evazzade I. et al. Graphene nanoribbon as an elastic damper // Nanotechnology. 2018. Vol. 29, № 21. P. 215704.

ПОЛУЧЕНИЕ СПЕКТРОВ МЕТОДОМ РЕНТГЕНО- ФЛЮОРЕСЦЕНТНОГО АНАЛИЗА И МЕХАНИЗМЫ РАЗРУШЕНИЯ СПЛАВА 36НХТЮ ПРИ ОДНООСНОМ РАСТЯЖЕНИИ

Ахметжанов Б.К.¹, Макашина К.А.¹, Шевчук Е.П.¹, Плотников В.А.²

¹*Восточно-Казахстанский Государственный Университет им.
С. Аманжолова, Усть-Каменогорск, Казахстан*

²*Алтайский государственный университет, Барнаул, Россия
E-mail: makashina94@mail.ru*

В данной работе в качестве материала исследования был выбран аустенитный дисперсионно-твердеющий сплав 36НХТЮ, содержащий (Основа Fe - 43,61–48%, Ni - 35-37%, Cr - 11–13,5%, Ti - 2,7–3,2%, Al - 0,9– 1,2%) [1].

Выбор материала обоснован тем, что сплав 36НХТЮ достаточно хорошо изучен в области фазово-структурных состояний и широко используется в промышленности для изготовления упругих чувствительных элементов (пружины, сильфоны, гофры, мембраны, трубки Бурдона и др.) приборов теплотехнического контроля [2].

Исследование количественных и качественных характеристик образца сплава 36НХТЮ проводили на рентгенофлуоресцентном спектрометре «СРВ-1В» производства ТОО «ТехноАналит» (Казахстан, г. Усть-Каменогорск) [3,4]. Энергия зарегистрированного флуоресцентного излучения (характеризуется положением аналитического пика на спектре излучения от атомов пробы) соответствует атомному номеру излучающего элемента, а интенсивность (характеризуется высотой аналитического пика) пропорциональна его концентрации. Следовательно, были получены спектры для качественного и количественного анализа образца, влияющие на результаты эксперимента при одноосном растяжении сплава.

Всего для образца сплава 36НХТЮ было проведено 27 исследований в различных режимах спектрометра с различными значениями экспозиции, напряжениями на детектор и вторичными мишенями (С, Ti, Мо, Ag, Cs). Из полученных спектров путем сравнительного анализа был выбран наиболее информативный со следующими режимами прибора (Табл. 1):

Таблица 1.
Оптимальные режимы образца сплава 36НХТЮ на
рентгенофлуоресцентном высокочувствительном спектрометре типа
«СРВ-1В»

Напряжение	35000-42000В
Экспозиция	360 с
Вторичная мишень	Ag

В ходе исследования был выбран спектр, в полной мере описывающий качественный и количественный состав сплава 36НХТЮ (рис. 1):

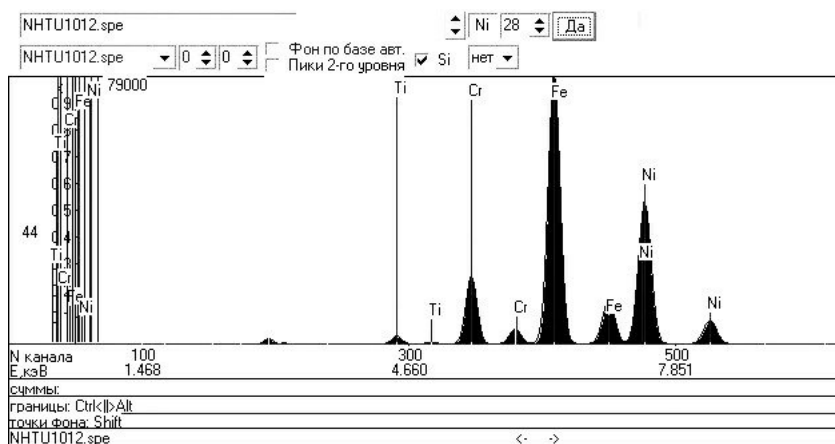


Рис. 1. Спектр образца 36НХТЮ, полученный на рентгенофлуоресцентном высокочувствительном спектрометре типа «СРВ-1В».

Поскольку при усталостном изгибе образцов на их внешней поверхности действуют растягивающие напряжения, приводящие к хрупкому разрушению, были сопоставлены механизмы разрушения при изгибе и одноосном растяжении. Статическое испытание на одноосное растяжение можно рассматривать в ряду усталостных испытаний как частный случай с замедленным нагружением до максимального напряжения, соответствующего напряжению разрушения.

При однократном воздействии нагрузки на материал с непрерывным типом распада хрупкость излома макроскопически сохраняется с приобретением квазихрупкого характера (рис. 2а), с нечетко выраженной кристаллографичностью. На изломе можно наблюдать обширные области ямок (рис. 2б).

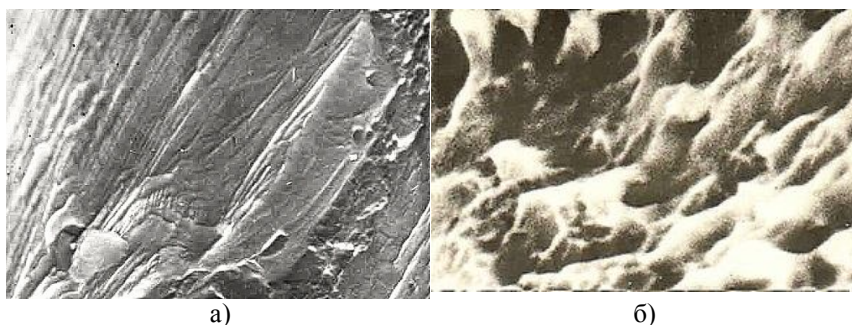


Рис. 2: а) квазихрупкие площадки скола при одноосном растяжении сплава со структурой непрерывного распада, $\times 1700$; б) ямочная структура излома между квазихрупкими участками скола, $\times 9000$.

Из эксперимента по растяжению образцов из сплава с ламельной структурой на рис. 3 можно увидеть, что поверхность разрушения представляет собой типично вязкую картину ямок, достаточно глубоких и мелкодисперсных, что говорит о большой энергоемкости процесса разрушения. Разрушения наблюдаются именно в объеме ячеек, а не по границам.

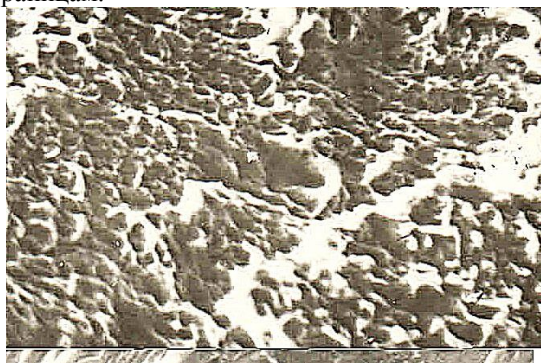


Рис. 3. Ямочный излом при одноосном растяжении сплава с прерывистым типом распада, $\times 2300$.

Начало развитие микротрещины, как уже было отмечено выше, наблюдалось от края образца. Магистральная трещина в среднем направлена перпендикулярно оси растяжения и имела зигзагообразный профиль на всех участках. Разрушение локализовалось в узком канале шириной порядка нескольких микрон, вдоль которого вначале развивалась пластическая зона, в которой в дальнейшем появлялись

микротрещины. Длина пластической зоны превышает в несколько раз длину трещины.

На рис. 4 можно увидеть участки в пластической зоне, в которых появились микротрещины. В местах А, В и С пластическая зона резко приобретает характерные очертания границ ячеек.

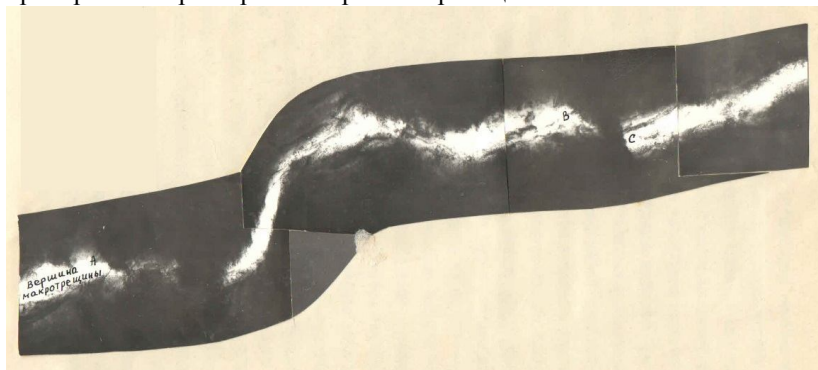


Рис. 4. Зигзагообразный профиль магистральной трещины

Деформации, приводящие к разрушению, составляют десятки доли процента для материалов обеих структур. Наиболее мощное развитие пластической зоны, микротрещин и рос магистральной трещины наблюдается при разгрузке, и чем резче и с более высокого уровня происходит сброс нагрузки, тем интенсивнее развивается разрушение.

Сравнивая картины разрушения сплава 36НХТЮ с двумя разновидностями морфологии выделения упрочняющей γ -фазы, можно сделать следующие выводы:

1. Макромеханизм разрушения для непрерывного и прерывистого распада и видов испытания носит транскристаллитный характер. Границы зерен и ячеек как элементы структуры сплава обладают большей прочностью, чем материал тела зерен и ячеек.

2. Для непрерывного и прерывистого распада при усталостных испытаниях разрушение приобретает более хрупкий характер, чем при одноосном растяжении. При многоциклового усталости хрупкость материала в большей степени выражена у сплава с непрерывным типом распада. В этом случае наблюдается разрушение в виде скола с областями, размеры которых составляют заметную долю от ширины образца.

3. Макротрещина у испытанного образца начинает свое развитие с края образца, где пересекаются две боковые поверхности по ширине и толщине. Преимущественное возникновение трещин ожидалось в объемах материала, для которых за единицу массы приходится большая поверхность.

Список литературы

1. Молотиллов Б.В.// Справочник. Под ред. Молотилова Б.В. // М.: Металлургия. – 1983. – 284 с.
2. Суховаров В.Ф. Прерывистое выделение фаз в сплавах // Новосибирск: Наука. – 1983. – 168 с.
3. Веригин А.А. Энергодисперсионный рентгеноспектральный анализ. Применение в промышленности. – Томск: Изд-во Том. ун-та. – 2005. - 242 с.
4. Макашина К.А., Веригин А.А., Ахметжанов Б.К. Высокоэнергетическое воздействие на стареющий сплав 36НХТЮ и получение спектров методом рентгенофлуоресцентного анализа/К.А. Макашина, А.А. Веригин, Б.К. Ахметжанов // Актуальные научные исследования в современном мире. – 2018 - Выпуск 4(36) ч. 4, с. 48-55

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ ПРИ СПЕКАНИИ БЕРИЛЛИЕВОЙ КЕРАМИКИ

Сапрыкин Д. Н., Попов А.С., Эссаулов В.В., Проскурин И.П.,
Федоренко Д.Е., Насибуллин Р.В.

*ВКГУ им. С. Аманжолова; г. Усть-Каменогорск, Казахстан
СФУ, г.Красноярск; ТГУ г. Томск, Россия*

E-mail: saprykin-dmitry@mail.ru , dmitryfedorenko@mail.ru

Научный руководитель-Квеглис Л.И.

Аннотация

Экспериментально обнаружено появление ферромагнетизма в бериллиевой керамике, имеющей структуру перовскита BeTiO_3 . Предлагаются модели для объяснения причины появления обнаруженных магнитных и электрических свойств.

Введение

Оксиды переходных металлов демонстрируют замечательный диапазон магнитных, сверхпроводящих и многоферроидных фаз, которые представляют большой научный интерес и потенциально способны обеспечить инновационные платформы для энергетики, безопасности, электроники и медицинских технологий. [1] При

размерах частиц порошков менее 100 нм становятся сильно зависимыми от размера основные физико-химические свойства вещества за счет дополнительного вклада энергии поверхности и дефектов структуры в общую энергию частиц. Высокая энергонасыщенность нанопорошков приводит к их повышенной активности при спекании. Для формирования тонкой наноразмерной структуры плотной керамики важно ограничить рост кристаллитов [2]. На рис. 1 представлены экспериментальные результаты, полученные на образцах бериллиевой керамики: петля магнитного гистерезиса.

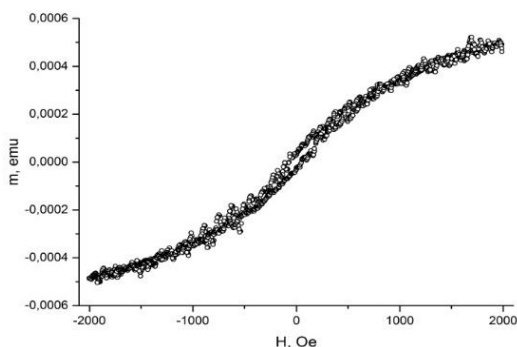


Рис. 1. Петля магнитного гистерезиса, полученная от образца бериллиевой керамики при комнатной температуре.

Анализ картин рентгеновской дифракции, полученных от бериллиевой керамики, в которой обнаружены аномальные ферромагнитные и электрические свойства, свидетельствует о значительных атомных смещениях в структуре.

Данные рентгеноструктурного анализа и оценка отклонений атомных смещений структуры перовскита при спекании порошков $\text{BeO} + \text{TiO}_2$ с добавлением нанопорошка TiO_2 приведены в таблице 1.

Таблица 1.

Данные рентгеноструктурного анализа и оценка отклонений атомных смещений структуры перовскита при спекании

№	угол 2 θ	d(□)	d табл Горели к	hkl	I	$\Delta d(\square)$	Δd (в %)
1	27,3	3,262847	3,24	110	0,8	0,022847087	0,705157
2	29,5	3,024329	3,024	-	-	0,000328782	0,010872
3	36	2,491772	2,49	101	0,6	0,001772343	0,071178

4	38,5	2,335523	2,29	200	0,004	0,045522742	1,987893
5	41	2,198697	2,19	111	0,3	0,008697233	0,397134
6	44	2,05549	2,05	210	0,12	0,005489715	0,267791
7	47,5	1,911872	1,91	-	-	0,001871703	0,097995
8	48,5	1,874762	1,87	-	-	0,004761762	0,25464
9	54,3	1,687406	1,69	211	1	0,002593541	0,153464
10	57,5	1,600869	1,62	220	0,3	0,01913102	1,180927
11	64	1,453052	1,449	310	0,2	0,004051534	0,279609
12	70	1,342454	1,35	301	0,3	0,007545967	0,558961
13	77	1,236919	1,245	112	0,04	0,008081292	0,6491

Наночастица TiO_2 , соединяясь с кластерами BeO , создает кристаллическую структуру перовскита, отличную от классической структуры. На рисунке 2 приведены различные структурные модели бериллиевой керамики-два типа 12-ти вершинников: слева классический кубооктаэдр, справа -икосаэдр из атомов кислорода, окружающий атом бериллия. Икосаэдрическая фаза определена нами из расшифровки спектров рентгеновской дифракции.

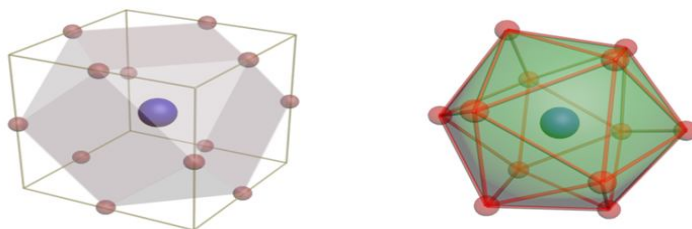


Рис.2. Два типа 12-ти вершинников-кубооктаэдр и икосаэдр (справа). В центре атом бериллия, окруженный атомами кислорода.

Эта фаза появляется в результате смещений атомов кислорода при взаимодействии порошковой смеси с наночастицами TiO_2 . В результате происходят кооперативные смещения атомов кислорода и титана на наномасштабном уровне, и формируются кластеры, имеющие структуру перовскита. На рисунках 3 и 4 изображены фотографии различных проекций моделей перовскита, построенных в программе 3dsMax до и после кооперативных атомных смещений, которые явились результатом кластерных искажений. Такие искажения характерны для структуры перовскита. Модели были построены на

основе реальных экспериментальных данных, полученных из расшифровки спектров рентгеновской дифракции. На рисунке 3а приведено изображение 3d модели структуры перовскита выполненной по данным приведенным в работе [3].

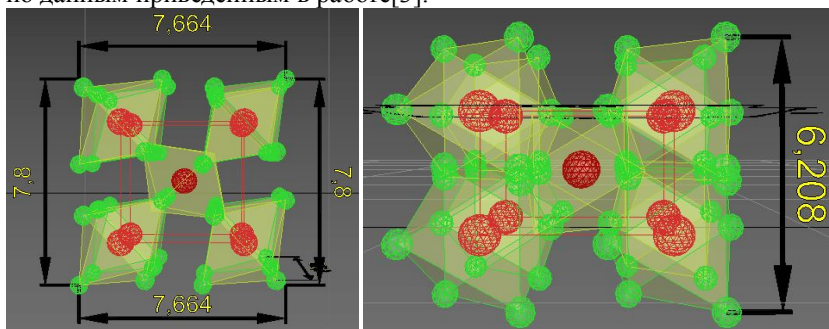


Рис. 3. Модель перовскита до искажения.

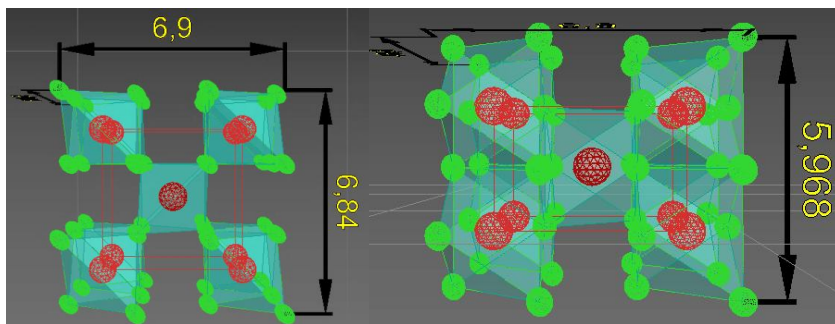


Рис. 4. Модель перовскита после искажения.

Размеры октаэдров указаны в ангстремах, изначально выполнялось построение модели куба с размерами длины и ширины $4,58 \text{ \AA}$ и высотой $2,97 \text{ \AA}$ (условно куб обозначен красными тонкими сплошными линиями). В центр куба был помещен правильный октаэдр, все ребра которого были равны $3,24 \text{ \AA}$ (октаэдр обозначенный желтым цветом). На рисунке 3 видно, что в центрах вершин куба были размещены идентичные центральному правильные октаэдры. Исходя из рисунка 4 можно видеть, как были изменены размеры структурной единицы перовскита в целом и возможно увидеть изменение положений зеленых сфер (атомов кислорода) относительно друг друга. Размеры октаэдров (обозначены синим цветом на рисунке 3) после «деформации» так же изменились во всех 3 направлениях по осям x, y,

z.

Исследования магнитных свойств кластеров, формируемых в структурах на основе BeTiO_3 , проводились в рамках теории функционала электронной плотности (DFT) [4] с использованием базиса плоских волн и ультрамягких псевдопотенциалов [5]. Для расчетов применяли пакет программ QuantumESPRESSO [6]. Обменно-корреляционный функционал в приближении обобщенной градиентной поправки (GGA) был взят в форме Perdew–Burk–Ernzerhof (PBE) [7,8]. Энергию отсечки базиса плоских волн полагали равной 60 Ry. Расчеты электронной структуры осуществляли интегрированием в зоне Бриллюэна с использованием k -сетки $4 \times 4 \times 4$, построенной по методу Монкхорста—Пака [9]. Выбранные параметры расчета определялись из исследования сходимости полной энергии и величины магнитного момента кластера от величины базиса плоских волн и разбиения зоны Бриллюэна.

Для исследования магнитных свойств октаэдрических и икосаэдрических фаз BeTiO_3 был проведен спин-поляризованный расчет для изолированных кластеров BeO_6 и BeO_{12} , которые представляют собой октаэдр и икосаэдр соответственно. В центре каждого кластера был помещен атом Be и атомы O располагались по вершинам. Длины сторон для каждого кластера равны 3.24 Å. В результате расчета, магнитный момент для октаэдрического кластера (BeO_6) получился равным $8 \mu_B$. Также, из анализа плотностей электронных состояний для каждого из рассматриваемых кластеров, изображенных на Рисунке 5, видно, что появление магнитного момента объясняется различным распределением плотности электронных состояний с противоположными спинами.

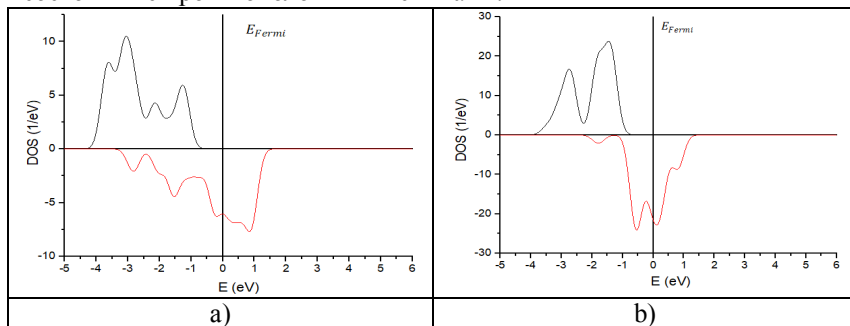


Рис. 5. Плотности электронных состояний для:
а) октаэдрического кластера, б) икосаэдрического кластера.

Таким образом, результат расчета объясняет наблюдаемый в эксперименте рост намагнитченности для порошков BeTiO_3 при переходе из октаэдрической в икосаэдрическую фазу. В [10] были исследованы пространственные группы, отношения параметров порядка и деформации / отношения параметров порядка в структурах перовскита ABX_3 (3), приводятся параметрические связи и возможные фазовые переходы с использованием разложений свободной энергии Ландау.

Выводы

1. Особенности физических свойств бериллиевой керамики связаны с особенностями электронной структуры перовскита BeTiO_3 .
2. Икосаэдрический ближний порядок может создавать высокую электронную плотность, приводящую к появлению намагнитченности в бериллиевой керамике.

Список литературы

1. Кийко В.С. Микроструктура и электропроводность композиционной $(\text{BeO}+\text{TiO}_2)$ -керамики / В.С. Кийко, М.А. Горбунова, Ю.Н. Макурин [и др.] // Новые огнеупоры. – 2007. - №11. – С. 68-74.
2. Кийко В. С., Павлов А. В. Композиционная $(\text{BeO} + \text{TiO}_2)$ -керамика для электронной и других областей техники // Новые огнеупоры. – 2017. №12. – С. 64 – 70.
3. Булах А.Г. Общая минералогия. Изд. второе, испр. и перераб.: Учебник. — СПб.: Изд-во С.-Петерб. ун-та, 1999. 356 с.
4. Hohenberg P, Kohn W, Inhomogeneous Electron Gas. // Phys. Rev. 136, B864 (1964)
5. Vanderbilt D. Soft Self-Consistent Pseudopotentials in a Generalized Eigenvalue Formalism // Phys. Rev. B. 41. P. 7892, (1990)
6. P. Giannozzi et al., QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials, J. Phys.: Condens.Matter 21, 39 (2009)
7. John P. Perdew, Kieron Burke, and Matthias Ernzerhof, Generalized Gradient Approximation Made Simple // Phys. Rev. Lett. 77, 3865 (1996)
8. 19. John P. Perdew, Kieron Burke, and Matthias Ernzerhof, Generalized Gradient Approximation Made Simple. // Phys. Rev. Lett. 78, 1396 (1997)
9. H. J. Monkhorst, J. D. Pack, Special points for Brillouin-zone integrations. // Phys. Rev. B 13, 5188 (1976)
10. Carpenter, MA (Carpenter, Michael A.); Howard, CJ (Howard, Christopher J.).Symmetry rules and strain/order-parameter relationships for

coupling between octahedral tilting and cooperative Jahn-Teller transitions in ABX(3) perovskites. Acta crystallographica section b-structural science crystal engineering and materia 65,,: 134-146

ОСОБЕННОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ФИЛЬТРА ГАБОРА В ТЕХНОЛОГИИ ИДЕНТИФИКАЦИИ ПО ОТПЕЧАТКАМ ПАЛЬЦЕВ

Минакова Н.Н., Едакин Н.В., Иванова В.В.

Алтайский государственный университет, Барнаул, Россия

E-mail: nikswat@mail.ru

Возрастание информационных потоков сделало очень актуальной проблему обеспечения информационной безопасности. Среди применяемых механизмов обеспечения информационной безопасности важная роль отводится идентификации и аутентификации личности в информационной системе [1]. Распространенным способом биометрической идентификации является идентификация по отпечаткам пальцев из-за невысокой стоимости, простоты использования [2].

Совершенствование технологии идентификации по отпечаткам пальцев актуально, так как существует комплекс проблем, приводящих к увеличению ошибок первого и второго рода таких биометрических систем: сухость или влажность кожи; температура кожи; сила и угол прижатия пальца к сенсору; нарушения папиллярного рисунка пальцев из-за воздействия химии, травм и т.д. [3]. Этап предобработки исходного изображения также связан с несколькими проблемами. Одной из них является настройка параметров фильтра Габора в конкретных условиях.

Целью данной работы является подбор параметров фильтра Габора для предобработки изображения.

Задачи работы:

- провести экспериментальные предобработки изображений отпечатков пальцев из открытых баз данных FVC2000-2006 [4];
- провести численные эксперименты, позволяющие выявить влияние параметров фильтра Габора на характер изображения.

Обычно этап предобработки изображения состоит из следующих шагов [5]:

- Эквиализация гистограммы изображения (equalizeHist).
- Применение фильтра Габора для чёткого выделения папиллярных линий.

- Бинаризация изображения.
- Скелетизация.

Эквализация гистограммы применяется для улучшения визуального качества изображения. В результате эквализации гистограммы в большинстве случаев существенно расширяется динамический диапазон изображения, что позволяет отобразить ранее незамеченные детали. Особенно сильно этот эффект проявляется на тёмных изображениях [6]. Пример обработки на рис.1.

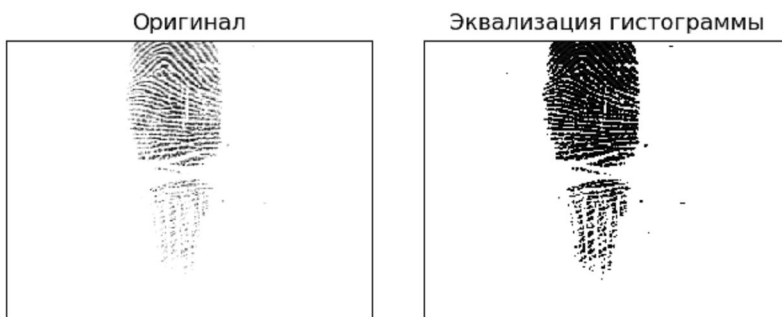


Рис.1. Обработка изображения методом эквализации гистограммы

Главная цель бинаризации — радикальное уменьшение количества информации, с которой необходимо работать [7]. Неудачи в процессе бинаризации могут привести к искажениям изображения — разрывы в линиях, потеря значащих деталей, нарушение целостности объектов, появление шума и непредсказуемое искажение символов из-за неоднородностей фона и т.д. (рис. 2).

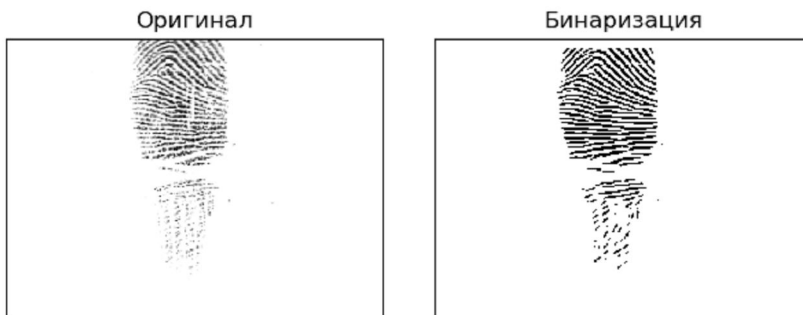


Рис.2. Применение бинаризации к изображению отпечатка пальца

Скелетизация уменьшает ширину двоичных объектов до 1 пикселя [8]. Этот этап выполняется не во всех способах анализа отпечатка пальца [9].

Для выполнения второго шага алгоритма фильтрации изображения был выбран фильтр Габора из-за его хорошей применимости для периодических изображений. Двумерный фильтр Габора описывается следующей формулой [10]:

$$h(x, y) = \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2\sigma^2}\right) \cdot \cos 2\pi f(x \cdot \sin\theta + y \cdot \cos\theta), \quad (1)$$

где σ — предполагаемое отклонение стандартного распределения, f — частота, θ — ориентация фильтра, x, y — координаты точки.

Численные эксперименты выполнялись на изображениях, взятых из базы данных FVC2004. Применена следующая технология использования фильтра Габора. Создаётся ядро (маска) фильтра, в котором настраиваются все вышеперечисленные параметры с добавлением нового, необходимого в обработке - (размерности самого ядра). От правильной настройки данных параметров в значительной степени зависит результат обработки изображения. На рис. 3 представлены разные варианты ядра фильтра.



Рис. 3. Маски фильтра Габора одной размерности и разных параметров

Для решения задачи подбора коэффициентов фильтра Габора использовано несколько способов:

- фильтр применялся ко всему изображению сразу;

- фильтр применялся к отдельным частям изображения.

При реализации первого способа экспериментальным путём было обнаружено, что определяющее значение для правильной обработки изображения имеют два коэффициента фильтра — размер маски фильтра и ориентация фильтра θ . Остальные параметры были зафиксированы в константном значении. На рис. 4а показано применение фильтра с большой размерностью, на рисунке 4б — с маленькой. В обоих случаях ориентация фильтра была равна 0. Исходный размер изображения 480х640 пикселей.



Рис. 4. Результат применения фильтра ко всему изображению:
а) с маской размерностью 21х21 пиксель, б) - размерностью 5х5 пикселей.

При увеличении размера маски качество обработки ухудшалось. При уменьшении папиллярные линии становились тоньше, появлялись лишние разрывы, неточности в фильтрации линий (рис. 4б). Можно полагать, что это вызвано тем, что угол направления линий не совпал с ориентацией фильтра. Было решено проверить вариант с применением фильтрации к отдельным блокам изображения, учитывая угол наклона линий в этом блоке.

На следующей итерации изображение отпечатка разбивалось на квадраты одинакового размера. Были проверены разные размеры областей: от 16х16 пикселей до 240х320. Для вычисления угла наклона линий в блоке применён метод главных компонент (РСА). С помощью этого метода определялись собственные вектора каждого блока. На основе полученных векторов вычислен угол направления линий. На рис. 5 представлены результаты применения такой настройки фильтра.



Рис.5. Поблочное применение фильтра Габора с подсчётом угла методом PCA: а) блоки размером 16х16, б) блоки размером 240х320

Установлено, что при уменьшении размеров обрабатываемых областей изображение полностью искажается. Если увеличивать размеры блоков, то изображение становится чётче, однако остаются области, в которых линии имеют разрывы.

На основе полученных результатов была предложена технология, объединяющая два метода в один по принципу взаимодополнения. Последовательность действий, следующая:

- всё изображение фильтруется на 8 заранее заданных углов;
- все изображения делится на 8 частей.
- в каждой части определяется угол с помощью метода PCA;
- выполняется сравнение угла со всеми углами, на которые была отфильтрована эта часть.

- выбирается область с самым лучшим совпадением углов.

Таким образом, было получено 8 блоков с нужными углами.

Установлено, что в тех областях, где преобладал белый цвет, угол с помощью PCA определился неверно (рис. 6а). Результат улучшается при увеличении количества линий (рис. 6б).



Рис. 6а. Некорректный результат работы метода PCA:

а) исходный блок, б) обработанный блок



а) б)
Рис. 66. Корректный результат работы метода PCA:

а) исходный блок, б) обработанный блок

Полученные результаты позволяют сделать следующие выводы:

1. При использовании фильтра Габора для предобработки изображений отпечатка пальца весомыми параметрами являются размерность ядра фильтра и его ориентация.
2. Размерность ядра всегда должна быть значительно меньше исходного изображения и не должна превышать размеров блоков, если применяется поблочная фильтрация.
3. Расчет угла ориентации фильтра необходимо выполнять на основании расположения линий в обрабатываемой области.

Библиографический список

1. Минакова Н.Н., Поляков В.В., Толстошеев С.Н. Методы технической и правовой защиты информации в сети Интернет: монография. – Барнаул, 2015. ISBN 978-5-7904-1958-4

2. Сравнение алгоритмов поиска особых точек на отпечатках пальцев. URL:

https://www.google.ru/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&source=web&cd=10&ved=2ahUKEwiA3pbS1dbdAhWKCywKHd-gCb8QFjAJegQIARAC&url=http%3A%2F%2Fse.math.spbu.ru%2FSE%2FYearlyProjects%2F2013%2FYearlyProjects%2F2013%2F361%2F361-Borisova-report.pdf&usg=AOvVaw1-TBCUkdiRulfPwmo_fcws
[Электронный ресурс]. (дата обращения: 15.11.2018)

3. Плохо работает Touch ID: ваши действия. URL:
<http://topasnew.com/1268-ploho-rabotaet-touch-id-vashi-deystviya.html>
[Электронный ресурс]. (дата обращения: 02.11.2018)

4. Biometric System Laboratory. FVC databases. URL:
<http://biolab.csr.unibo.it/DatabaseSoftware.asp?organize=Databases&select>

=22&selObj=&pathActiv=&pathSubj= [Электронный ресурс]. (дата обращения: 23.10.2018)

5. Fingerprint matching in mobile devices (Android platform). URL: <http://answers.opencv.org/question/6364/fingerprint-matching-in-mobile-devices-android-platform/#6370> [Электронный ресурс]. (дата обращения: 20.11.2018)

6. Эквализация гистограмм для повышения качества изображений. URL: <https://habr.com/post/244507/> [Электронный ресурс]. (дата обращения: 03.12.2018)

7. Бинаризация изображений: алгоритм Брэдли. URL: <https://habr.com/post/278435/> [Электронный ресурс]. (дата обращения: 05.12.2018)

8. scikit-image. Skeletonize. URL: http://scikit-image.org/docs/dev/auto_examples/edges/plot_skeleton.html [Электронный ресурс]. (дата обращения: 30.11.2018)

9. SourceAFIS. How it works. URL: <https://sourceafis.machinezoo.com/algorithm> [Электронный ресурс]. (дата обращения: 01.11.2018)

10. Кермани Коланкех Араш Нахождение параметров и удаление постоянной составляющей фильтра Габора для обработки изображений / Кермани Коланкех Араш, В. Спицын, Ф. Хамкер // Известия ТПУ. - Томск: ТПУ, 2011. -Т. 318, No5: Управление, вычислительная техника и информатика. - С. 57-59

ОЦЕНКА ХАРАКТЕРИСТИК МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ ПО ГРАНИЦАМ РАЗДЕЛА СРЕД НА МИКРОФОТОГРАФИЯХ СТРУКТУРЫ

Минакова Н.Н., Силютин А.С.

Алтайский государственный университет, Барнаул, Россия

E-mail: minakova@asu.ru

Наполненные полимеры широко применяются в электроэнергетике, строительстве, быту и т.д. [1-4]. Одна из проблем, снижающих эффективность применения – сложность прогнозирования характеристик на стадии проектирования из-за многокомпонентной структуры. Это связано со многими факторами, в том числе с тем, что свойства таких материалов во многом зависят от интенсивности взаимодействия наполнителя с матрицей [5]. Интенсивность взаимодействия проявляется во влиянии на равномерность

распределения наполнителя в объеме матрицы, толщине межфазных слоев и т.д.

Многокомпонентные структуры часто анализируются по микрофотографиям структуры. Можно предположить, что существует взаимосвязь между интенсивностью взаимодействия «наполнитель-матрица» и геометрией границ раздела сред. Поэтому при исследовании микрофотографий особый интерес представляют границы раздела сред. Они могут выделяться различным образом, в том числе и с помощью специально разработанных алгоритмов [3]. Подобные технологии существуют также при решении задач анализа широкого класса изображений.

Цель работы: выбрать технологию выделения границ раздела, используемую при анализе изображений, и оценить ее применимость к выделению границ раздела «наполнитель -матрица» в многокомпонентных полимерных материалах.

Были поставлены следующие задачи:

- выбрать алгоритм для выделения границ раздела «наполнитель-матрица» и реализовать его;
- выполнить численные эксперименты на изображениях макроструктуры наполненных полимеров;
- сделать вывод о целесообразности использования предложенного алгоритма для оценки свойств изучаемых материалов.

Для выделения границ при анализе изображений используются различные алгоритмы. В работе применен распространенный алгоритм оценки перепадов яркости. Он основан на следующем предположении: для поиска границы раздела достаточно рассмотрения окрестности радиусом в 1 пиксель. В этом случае для каждой точки изображения необходимо решать вопрос, проходит ли граница раздела сред через данную точку. Границей раздела будет переход от более яркой части изображения к более темной, или наоборот. Определение отсутствия или наличия такого перехода можно реализовывалось следующим образом: для каждой точки рассмотреть ближайшую окрестность и вычислить яркость границы в данной точке [6, 7]:

$$G_p = \sum_{n=1}^n \frac{g_p - g_n}{n} \quad (1)$$

где G_p – яркость границы в точке p ,

n – количество точек в окрестности

g_p и g_n – яркость рассматриваемой точки и точки окрестности

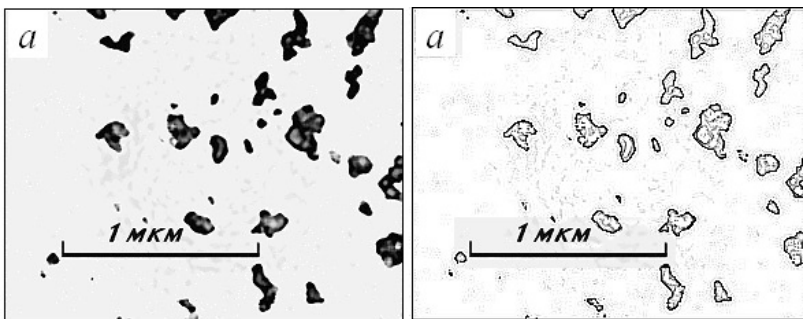
Если разница между яркостями в непосредственной окрестности точки мала, то можно предположить отсутствие границы. Если существует значительный перепад хотя бы по одному из направлений, граница будет явно обозначена. Если перепад яркости относительно незначителен, но различим, граница будет обозначена точкой,

По формуле (1) граница предполагается как переход от более яркой части изображения к более темной. Если необходимо обнаружить переход от более темной части к более яркой, то формула (1) приобретает вид:

$$G_p = \sum_n \frac{g_n - g_p}{n} \quad (2)$$

Среди преимуществ данного алгоритма можно отметить малую ресурсоемкость, возможность выделения нескольких независимых областей с различающимися яркостями.

Описанный выше алгоритм апробирован на микрофотографиях, наполненных техническим углеродом каучуков, анализируемых ранее в рамках других алгоритмов [8]. Эксперименты проводились на электронно-микроскопических снимках, содержащих матрицу БК-2055, электропроводящий наполнитель ПМ-234 с концентрациями 5, 10, 30 и 50 вес. ч. на 100 вес. частей материала матрицы. Визуализация результатов работы алгоритма представлена на рис. 1 (исходные/обработанные микрофотографии).



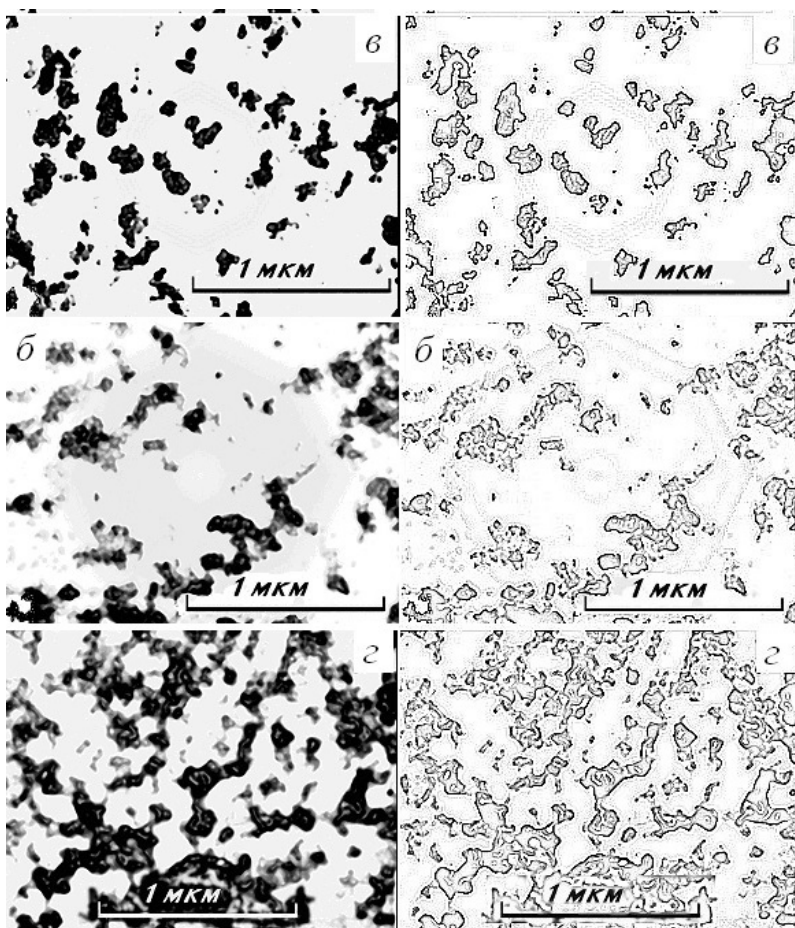


Рис. 1 Микрофотографии структур наполненных полимеров, матрица БК-2055, наполнитель ПМ-234, а – концентрация наполнителя 5; б - 10, в – 30, г - 50 вес. ч. на 100 вес. ч. каучука. Изображения слева – исходные структуры, справа – с выделенными границами сред.

Для изображений определялись статистические характеристики и фрактальные параметры. Результаты численных экспериментов представлены в таблице и рис. 2. Статистические характеристики перепадов яркости, определенные по микрофотографиям структуры выбранных объектов исследования для концентраций

электропроводящего наполнителя 5 и 50 весовых частей на 100 весовых частей полимера представлены в таблице.

Установлено, что статистические характеристики, полученные по исходным изображениям, имеют отличия по сравнению со статистическими характеристиками, определенными по микрофотографиям, в которые границы раздела сред выделены по рассматриваемой в работе технологии. Численные эксперименты показали, что выделение границ уменьшает значение статистических характеристик независимо от концентрации наполнителя.

Таблица
Статистические характеристики, рассчитанные по микрофотографиям структуры

Статистические характеристики	Исходные микрофотографии (5 в.ч./50 в.ч.)	Микрофотографии с выделенными границами (5 в.ч./50 в.ч.)
мат ожидание	244,0217918/242,1545234	217,490219/161,553863
дисперсия	9587,217383 /4817,249097	3338,899301 /2910,965627
смещённая оценка дисперсии	5748,083542/5538,186492	16256,25/16256,2
коэффициент асимметрии	0,319124/0,606079	0,23862122/0,2211000603
коэффициент вариации	7,137789/2,759537	0,906053269/0,891408027

На рис.2 представлен фрактальный параметр размерность Минковского (далее обозначена D_m), где используется покрытие множества шарами одного радиуса [9]. Оказалось, что эта зависимость немонотонная. Можно предположить, что это связано с чувствительностью к шумам, так как численные эксперименты по микрофотографиям, где границы раздела сред выделялись с помощью технологии, специально разработанной для таких материалов, показали, что зависимость фрактальных характеристик от концентрации электропроводящего наполнителя монотонная [10].

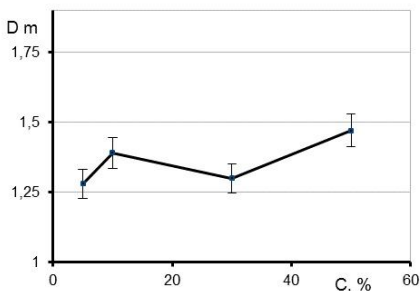


Рис. 2. Зависимость размерности Минковского от концентрации электропроводящего наполнителя (изображения с выделенными границами раздела сред)

Выполненные численные эксперименты позволяют сделать следующие выводы.

Статистические характеристики анализируемых изображений зависят от концентрации наполнителя. Такая зависимость меньше проявляется при выделении границ, больше при исходном изображении.

Фрактальная размерность Минковского для изображений с выделенными границами зависит от концентрации наполнителя монотонно.

Рассматриваемая в работе технология выделения границ сред влияет на характеристики материалов, однако не дает возможности прогнозировать фрактальный параметр.

Библиографический список

1. Гуль В.Е., Шенфиль Л.З. Электропроводящие полимерные композиции. – М.: Химия, 1984.
2. Криков В.С., Колмакова Л.А. Электропроводящие полимерные материалы. - М.: Энергоатомиздат, 1984. – 176 с.
3. Абраменко Е.А., Минакова Н.Н, Ушаков В.Я. Исследование свойств полиэтилена с наноразмерными наполнителями специальной обработкой изображений макроструктуры// Известия высших учебных заведений. Физика. - 2008. - Т. 51.- № 7. С. 39-42
4. Минакова Н.Н., Сквирская И.И., Ушаков В.Я. Высоковольтные характеристики материала на основе каучука с углеродным наполнителем для объемных резисторов //Электричество. - 1986. - № 5. - С. 59 – 60.
5. Липатов Ю.С. Физико-химические основы наполнения полимеров. - М.: Химия, 1991. - 260 с.

6. Васильев К. К. Статистический анализ многомерных изображений / К. К. Васильев, В. Р. Крашенинников. – Ульяновск : УлГТУ, 2007. – 170 с.

7. Статистический анализ данных, моделирование и исследование вероятностных закономерностей. Компьютерный подход: монография /Б.Ю.Лемешко, С.Б.Лемешко, С.Н.Постовалов, Е.В.Чимитова.— Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2011.— 888 с.

8. Минакова Н.Н., Карпов С.А., Ушаков В.Я. Текстульный метод исследования резистивных свойств дисперсно-наполненных эластомеров. //Известия высших учебных заведений. Физика. 2000, Т. 43, № 10, С. 16-23.

9. URL:
<https://ssl4799.websiteseuro.com/swge5/PROCEEDINGS/PDF/CBA2016-0853.pdf> [Electronic resource]. (date of the application 25.11.2018).

10. Бортников А.Ю., Минакова Н.Н. Текстульно-фрактальный анализ микроскопических срезов образцов композиционных материалов, наполненных техническим углеродом //Известия Томского политехнического университета. 2006. Т. 309, № 6. С. 64-67.

СТРУКТУРНЫЕ И МАГНИТНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В БЕРИЛЛИЕВОЙ КЕРАМИКЕ, С РАЗЛИЧНЫМ СОДЕРЖАНИЕМ НАНОПОРОШКА TiO_2

Тружников В.Ю., Трекова Я.А., Кантай Н., Юшков Н.Ю.,
Лещенко Д.В., Ештокина А.И., Станкеев В.В., Селин И.Н.

Научные руководители Квеглис Л.И. и Астафьева Е.А

E-mail: kveglis@list.ru.

*Восточно-Казахстанский государственный университет им. С.
Аманжолова*

*Сибирский Федеральный Университет, Политехнический
институт г.Красноярск, Россия.*

Аннотация

В работе исследуется природа возникновения и роста намагнитченности бериллиевой керамики в результате агломерации с добавлением нанопорошков TiO_2 . Предлагается экспериментальное обоснование причин появления ферромагнитных свойств.

Ключевые слова: нанопорошок двуокиси титана, структура рутила, бериллиевая керамика, рентгеновская дифракция, Лоренцева электронная микроскопия.

Введение

Керамика на основе оксида бериллия - это перспективный материал который сочетает высокую химическую, термическую, радиационную стойкость, высокую теплопроводность, малую величину диэлектрических потерь. Актуально совершенствование бериллиевой керамики на базе более глубокого исследования ее физико-химических и технологических свойств. [1-3]

При введении в BeO-керамику нанодispersного порошка TiO_2 , после изготовления и отжига образцов в восстановительной атмосфере отмечалось [1-4] значительное увеличение плотности, механической прочности, электропроводности и способности поглощать электромагнитное излучение в СВЧ-диапазоне спектра. В данной работе исследовались магнитные свойства материала этого состава до и после восстановительного отжига. Изделия из BeO- керамики, производят в виде порошков различной дисперсности, применяя технологии порошковой металлургии: используют методы полусухого прессования или шликерного литья с последующим спеканием.[1-4]

Целью данной работы было исследовать корреляцию структуры и физических свойств бериллиевой керамики. Чтобы иметь возможность проследить изменения структурных превращений и свойств оксидно-бериллиевой керамики модифицированной нанопорошком TiO_2 , использовали образцы с добавками нанопорошка TiO_2 5 и 30 мас. %

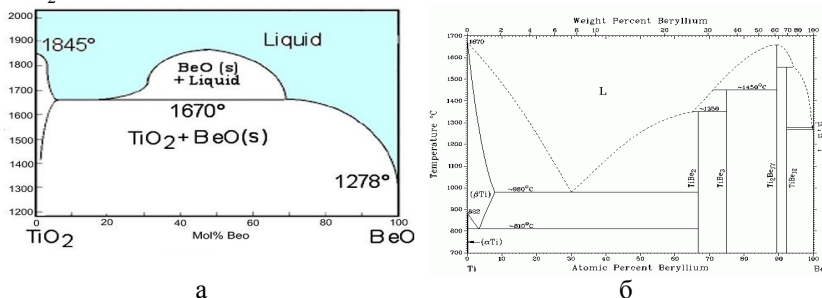


Рис. 1. Фазовая диаграмма: а - BeO- TiO_2 ; б - Be -Ti

На рис. 1 приведены диаграммы фазовых равновесий: для систем BeO - TiO_2 (рис.1а), для системы Be-Ti (рис.1б). Из диаграмм видно что возможно существование соединений титана и бериллия TiBe_2 , TiBe_3 , $\text{Ti}_2\text{Be}_{17}$, TiBe_{12}

Вторая группа образцов, имеющая состав BeO +30 мас. % TiO_2 , изучалась до термической обработки. Результаты рентгеновской дифракции образца этого состава показаны на рисунке 2 (нижний), где

они сопоставляются с результатом рентгеновской дифракции заводского образца БТ-30, (рис. 2, верхний).

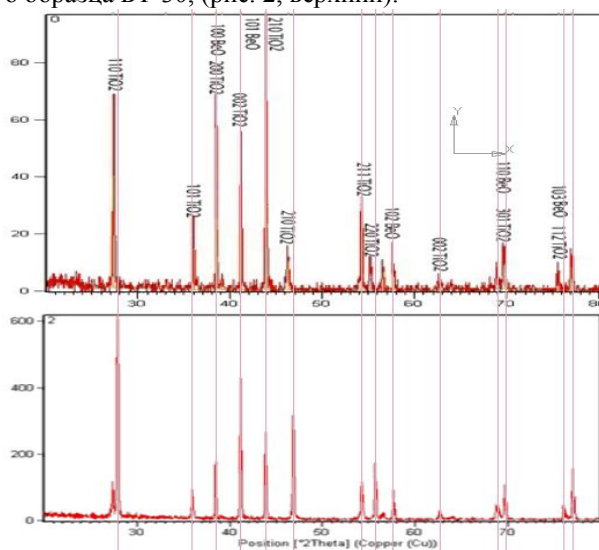


Рис. 2. Результаты рентгеновской дифракции экспериментального образца до отжига и заводского образца. Состав $\text{BeO} + 30\% \text{TiO}_2$. (Верхний рисунок – заводской, нижний – экспериментальный)

Результаты полученные при изучении изменений магнитных свойств образцов керамики $\text{BeO} + \text{TiO}_2$ в зависимости от их состава и режимов отжига при помощи магнитометра в поле 250 Э.[3, 4] демонстрирует рис. 3.

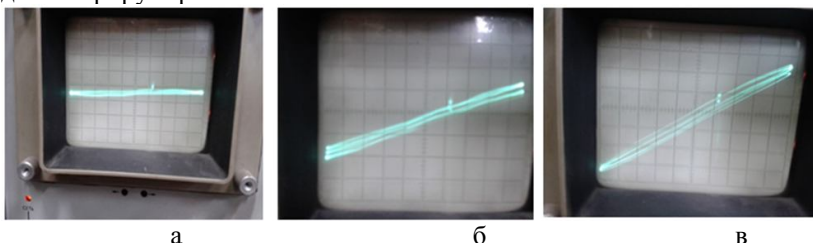


Рис. 3. Петли магнитного гистерезиса в образцах керамики $\text{BeO} + \text{TiO}_2$: а - исходное состояние до отжига -5 мас. % нанопорошка TiO_2 ; б - после отжига 1520 °С 5 мас. % нанопорошка TiO_2 ; в - до отжига 30 мас. % нанопорошка TiO_2 и для 5 мас. % нанопорошка TiO_2 после отжига 1800 °С

При содержании в образцах BeO-керамики 5 мас. % TiO_2 , на намагниченность влияет температура восстановительного отжига (рис. 3). Видно, что если в исходном состоянии (до отжига) магнитные свойства отсутствуют (рис. 3, а), то с повышением температуры отжига до 1520 и 1800 °С, намагниченность возрастает (рис. 3, б, в). При увеличении в образцах керамики количества нанопорошка TiO_2 до 30 мас. % произошло появление намагниченности до термообработки. Намагниченность достигла практически тех же значений, что и в образцах керамики с 5 мас. % TiO_2 после термообработки при 1800 °С, это удалось зафиксировать также при помощи магнитометра в поле 250 Э (рис. 3, в).

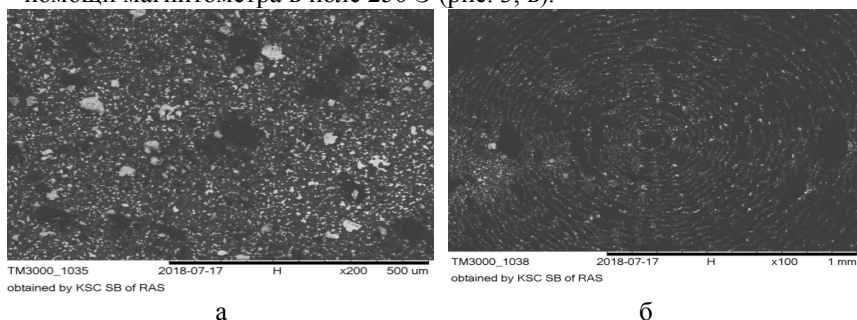


Рис. 4. Изображения порошков BeO+ TiO_2 на электронном сканирующем микроскопе М 3000: а - структура спеченных порошков; б - магнитная структура образца

На рис. 4 приведены микрофотографии, полученные в сканирующем электронном микроскопе от поверхности спеченных смеси нанопорошков BeO с двуокисью титана. На рис. 4, б, приведены изображения магнитного контраста от участка, показанного на рис. 4, а. Методом дифракции рентгеновских лучей исследовали структуру и фазовый состав оксидно-бериллиевой керамики с 30 мас. % нанопорошка TiO_2 (рис. 2). Согласно существующим исследованиям и расчетам [5], и данным табл. 1 определены кристаллогеометрические схемы ориентированного срастания кристаллитов TiO_2 и BeO, приводящих к формированию промежуточного слоя со структурой перовскита (рис. 5).[5-7]

Таблица 1.
Межплоскостные расстояния и HKL для TiO_2 , BeO , BeTiO_3

			TiO ₂				BeO (Cu)										Перовскит (BeTiO ₃)	
			Анализ		Рутил		Тетрагонал.				Гексагонал.							
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16			
№	Θ	d(n)	HKL	1	HKL	1	d(n)	HKL	1	d(n)	HKL	1	2Θ	Θ	d(n)	HKL		
1	13,65	3,262712					3,35	110	10	2,337	100	85	38,24	19,12	4,58			
2	18	2,491909			101	6	2,375	200	100	2,189	002	56	45,6	20,36	3,24			
3	19,5	2,305389			200	4	2,125	210	60	2,061	101	100	44,48	21,54	3,237			
4	20,5	2,2				1	1,676	211	20	1,597	102	19	57,42	28,54	2,97			
5	22	2,053333			210	2	1,500	310	10	1,349	110	28	69,48	34,54	2,73			
6	23	1,969309					1,37	002	30	1,238	103	22	76,60	38,30	2,647			
7	27	1,696035			211	1	1,316	311	6	1,168	200	4	82,48	41,18	2,29			
8	27,5	1,666667	211	24			1,187	202	10	1,149	112	14	84,12	42,6	2,1			
9	28,25	1,627907			220	2	1,152	410	2	1,129	201	4	86,12	43,6	1,929			
10	29	1,587629					1,062	411	2	1,095	004	1	89,24	44,42	1,872			
11	31,5	1,480769	204	24			0,897	103	2	1,031	202	2	96,48	48,24	1,716			
12	34,5	1,372549					0,882	511	2	0,991	104	1	102,00	51,00	1,62			
13	35	1,343805					0,868	332	2	0,912	203	5	116,36	57,48	1,578			
14	38	1,252033					0,840	440	2	0,883	210	2	121,36	60,48	1,485			
15	38,5	1,237942			112	4				0,866	211	2	124,48	62,54	1,365			
16	41,5	1,161388	224	6						0,850	114	1	130,00	65,00				
17	42	1,150972			400	4				0,820	105	5	140,12	70,6				
18	43,5	1,119186								0,819	212	2	140,36	70,18				

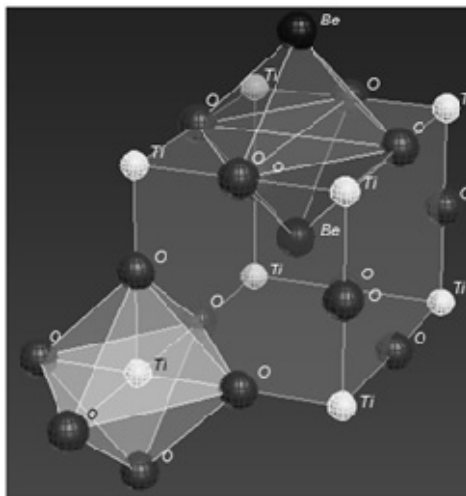


Рис. 5. Структура классического перовскита: - в центре - атом бериллия, окруженный 12-ю атомами кислорода и соответствует диэлектрической фазе;

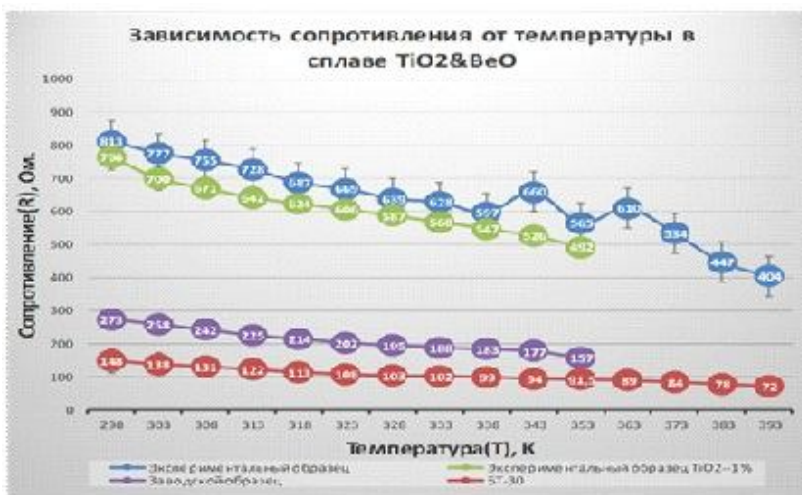


Рис. 6. Температурная зависимость электросопротивления для образцов бериллиевой керамики: 1) образец после отжига 1800C ; 2) образец после отжига 1520C; 3) и 4) заводской образец.

На рис. 6 приведен график зависимости электросопротивления от температуры образцов керамики с различным содержанием нанопорошка TiO_2 .

Из рисунка 6 видно что в заводских образцах, которые не содержат нанопорошка TiO_2 , электросопротивление практически не зависит от температуры. В образцах содержащих нанопорошок TiO_2 , электросопротивление может меняться в зависимости от температуры, возрастая и затем уменьшаясь. Такое поведение электросопротивления может быть связано с локальными участками образца, имеющими ферромагнитные свойства.

Выводы

1. При расшифровке картин рентгеновской дифракции полученной от бериллиевой керамики, фазы - TiBe_2 , TiBe_3 , $\text{Ti}_2\text{Be}_{17}$, TiBe_{12} обнаружены не были.

2.С помощью Лоренцевой микроскопии в сканирующем электронном микроскопе и магнитометрии обнаружено ферромагнитное состояние в образцах бериллиевой керамики.

3.С помощью рентгеновской дифракции установлено, что данная магнитная фаза имеет структуру перовскита BeTiO_3 .

4. Выявлены технологические условия появления ферромагнетизма и высокой электропроводности в образцах бериллиевой керамики.

Авторы благодарят Павлова А.В. за предоставленные к исследованию образцы.

Список литературы

1. Кийко В. С., Павлов А. В. Композиционная ($\text{BeO} + \text{TiO}_2$)-керамика для электронной и других областей техники / Новые огнеупоры. – 2017. №12. С. 64 – 70

2. Акишин, Г. П. Свойства оксидной бериллиевой керамики / Г. П. Акишин, С. К. Турнаев, В. С. Кийко [и др.] // Новые огнеупоры. — 2010. — № 10. — С. 42–47. Akishin, G. P. Composition of beryllium oxide ceramics / G. P. Akishin, S. K. Turnaev, V. S. Kijko [et al.] // Refractories and Industrial Ceramics. — 2011. — Vol. 51, № 5. — P. 377–381.

3. Кийко, В. С. Керамика на основе оксида бериллия: получение, физико-химические свойства и применение / В. С. Кийко, Ю. Н. Макурин, А. Л. Ивановский. — Екатеринбург : УрО РАН, 2006. — 440 с.

4. Кийко В.С. Микроструктура и электропроводность композиционной ($\text{BeO}+\text{TiO}_2$)-керамики / В.С. Кийко, М.А. Горбунова, Ю.Н. Макурин [и др.] // Новые огнеупоры. – 2007. - №11. – С. 6

5. Александров К.С., Безносиков Б.В. Иерархия перовскитоподобных кристаллов. Физика твердого тела, 1997, том 39, № 5. С. 785-808

6. Появление ферромагнетизма в наночастицах керамики со структурой перовскита BeTiO_3 . Pavlov A.V.^{1,2}, Kveglis L.I.^{1,2}, Nasibulin R.³ Saprykin D.², Zakharova E.V.¹ Velikanov D.A.^{1,4} Nemtzev I.V.¹ FGAOU IN Siberian Federal University, Krasnoyarsk, the Russian Federation. ²RGP on PHV "East Kazakhstan State University Ust-Kamenogorsk, Republic of Kazakhstan. ³Tomsk State University, Tomsk, Russia ⁴L.V. Kirensky Institute of Physics, Krasnoyarsk Russia *e-mail: kveglis@list.ru

7. P. Giannozzi et al., QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials, J. Phys.: Condens.Matter 21, 39 (2009)

8. Carpenter, MA (Carpenter, Michael A.) [1]; Howard, CJ (Howard, Christopher J.). Symmetry rules and strain/order-parameter relationships for coupling between octahedral tilting and cooperative Jahn-Teller transitions in ABX_3 perovskites. ACTA CRYSTALLOGRAPHICA SECTION B-

STRUCTURAL SCIENCE CRYSTAL ENGINEERING AND MATERIA
65,; 134-146

АТОМНЫЕ МЕХАНИЗМЫ УКРУПНЕНИЯ ЗЕРЕН ГЦК-КРИСТАЛЛА В УСЛОВИЯХ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО ВНЕШНЕГО ВОЗДЕЙСТВИЯ

Старостенков М.Д.¹, Маркидонов А.В.^{2,3}, Кустов С.Л.¹

¹ *Алтайский государственный технический университет,
Барнаул, Россия*

² *Филиал Кузбасского государственного технического
университета им. Т.Ф. Горбачева
в г. Новокузнецке, Россия*

³ *Сибирский государственный индустриальный университет,
Новокузнецк, Россия*

Известно, что границы зерен играют немаловажную роль при рассмотрении различных радиационно-стимулированных явлений. Например, образующиеся при облучении межузельные атомы мигрируют к стокам, которыми являются границы зерен, и образуют примесные сегрегации, закрепляющие дислокации, повышая тем самым предел текучести материала. При повышении температуры увеличивается диффузионная подвижность вакансий и образуется пористость по границам зерен, что является причиной радиационного охрупчивания. Рост пор возможен благодаря асимметрии взаимодействия различных несовершенств кристаллической структуры с точечными дефектами, и определяется наличием локальных направленных потоков вакансий на пору. Необходимая для этого восходящая диффузия может возникать, например, в полях упругих напряжений, создаваемыми объемными радиационными дефектами кластерного типа.

Увеличение размеров зерен может отрицательно сказываться на свойства нанокристаллов. Основным механизмом роста является миграция границ и слияние зерен в результате термообработки или механического деформирования [1]. Кроме того, существуют экспериментальные свидетельства миграции границ в результате облучения высокоэнергетическими частицами [2-4].

Учитывая важность контролирования процессов роста зерен при внешнем воздействии необходимо более тщательное его изучение, так как детали механизма миграции на атомном уровне не совсем понятны. Как правило, считается, что миграции границы способствует наличие на ней подвижных дефектов, таких как вакансии, примеси или

дислокации, но существуют работы, в которых миграция границ наблюдалась без участия дефектов [5]. С помощью только экспериментальных методов исследования, по-видимому, не удастся получить информацию о механизмах миграции отдельно взятой границы, так как при исследовании роста зерен результаты представляют собой усреднение данных по большому числу зерен. Поэтому в данном случае предпочтительней использовать методы компьютерного моделирования.

Воздействие потока высокоэнергетических частиц на твердое тело сопровождается образованием ударных послекаскадных волн [6], формирующихся в результате резкого расширения сильно разогретой каскадной области из-за различий времени термализации атомных колебаний в некоторой конечной области и времени отвода из нее тепла. Роль таких волн в инициации восходящей диффузии до этого не оценивалась. Ранее авторами были проведены исследования [7-10] в которых получены результаты, свидетельствующие о возможности модификации дефектной структуры кристалла ударными послекаскадными волнами путем перемещения отдельных дефектов даже при температурах, когда диффузионные процессы не активны.

Целью представленной работы является определение с помощью метода молекулярной динамики атомных механизмов миграции границ зерен под воздействием ударных волн, генерируемых в кристалле, на примере моделей границ зерен наклона и кручения.

Исследование проводилось с помощью метода молекулярной динамики на расчетной ячейке, моделирующей кристалл никеля. В качестве потенциальной функции межатомного взаимодействия использовался потенциал Джонсона, рассчитанный в рамках метода погруженного атома. Температура расчетной ячейки задавалась путем присвоения атомам случайных скоростей в соответствии с распределением Максвелла-Больцмана для указанной температуры. Шаг численного интегрирования уравнений движения равнялся 5 фс. Компьютерный эксперимент проводился на расчетной ячейке, состоящий из 27 000 атомов. Оси расчетной ячейки X , Y и Z соответствовали кристаллографическим направлениям $[1\bar{1}0]$, $[11\bar{2}]$ и $[111]$ соответственно. Параметр решетки равнялся 3.52 Å.

Для конструирования границы зерен наклона применялась методика, изложенная в [15]. Граница зерен общего типа создавалась путем разбиения расчетной ячейки на два блока и поворота их относительно друг друга относительно оси Z , которая параллельна

плоскости создаваемой границы, на некоторый угол $\theta/2$. Получившиеся зерна сближались на расстояние, при котором потенциальная энергия расчетной ячейки минимальна, после чего следовала процедура релаксации. Для создания границы зерен кручения блоки, на которые разбивалась расчетная ячейка, поворачивались в противоположные стороны относительно друг друга на некоторый угол $\theta/2$ вдоль оси X , которая перпендикулярна плоскости создаваемой границы. В обоих случаях для сохранения геометрии расчетного блока использовалась комбинация жестких и периодических граничных условий. Для проверки адекватности построенных моделей была рассчитана удельная энергия γ , отнесенная к единице площади границы, которая вычислялась как разность энергии расчетной ячейки, содержащей границу зерен, и энергии идеальной расчетной ячейки, состоящей из того же числа атомов. Полученные значения γ не противоречат данным, представленным в работах сторонних авторов, поэтому построенные модели могут быть использованы для проведения дальнейших расчетов.

Для создания ударной волны в расчетной ячейке выделялась кристаллографическая плоскость $(1\bar{1}0)$, содержащая граничные атомы, которым присваивалась равная по величине скорость, превышающая скорость продольных звуковых волн, и вектор которой ориентирован по нормали к выделенной плоскости. Плотнупакованное направление было выбрано потому, что из-за наличия механизмов фокусировки энергии, сферическая волна трансформируется во фрагменты плоских волн, распространяющихся именно вдоль таких кристаллографических направлений. В результате последующих эстафетных кооперативных атомных смещений формируется бегущая волна, ширина фронта которой не превышает нескольких межатомных расстояний, а амплитуда смещений атомов значительно превышает, например, амплитуду тепловых колебаний. Для того чтобы исключить рост температуры расчетной ячейки, возникающий при создании ударной волны, использовался пропорциональный термостат.

Проведенное исследование показало, что построенные модели поликристаллов остаются стабильными при генерации в них ударных волн в широком диапазоне температуры расчетной ячейки, и процесс миграции границы зерен не наблюдается. Активировать данный процесс возможно с помощью дополнительных напряжений в расчетной ячейке, создавая в ней деформацию растяжения. Так, например, граница зерен кручения при создании подобных деформаций и поддержании температуры расчетной ячейки не ниже

половины температуры плавления начинает мигрировать по направлению к источнику генерации волн, в результате чего осуществляется рост одного из зерен. Увеличение числа генерируемых ударных волн приводит к большему росту зерна. Так на рисунке 1 представлены срезы атомных плоскостей расчетной ячейки, демонстрирующие последовательный рост зерна. Отметим, что полному повороту атомной плоскости препятствует использование жестких граничных условий.

Исследование показало, что существует два атомистических механизма миграции границы зерен кручения. При малых углах разориентации миграция осуществляется путем кооперативных смещений групп атомов вдоль ядер зернограничных дислокаций. Данный процесс приводит к повороту атомной плоскости на угол θ . Для большеугловых границ зерен, когда ядра дислокаций начинают перекрываться, доминирующим механизмом миграции границ зерен становится локальная аморфизация структуры, возникающая при прохождении ударной волны по зернограничной области, с последующей повторной кристаллизацией на втором зерне.

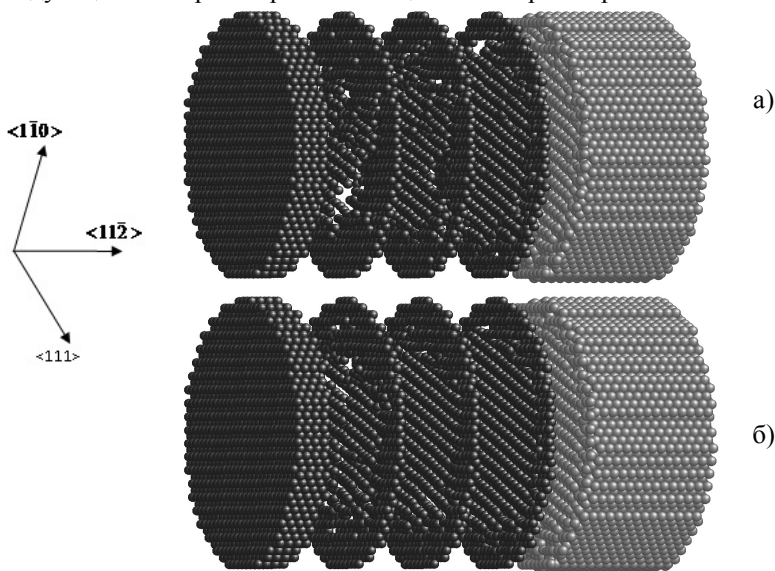


Рис.1. Срезы плоскостей $(1\bar{1}0)$ одного из зерен расчетной ячейки ($\theta = 20^\circ$) после прохождения двух (а) и четырех (б) ударных волн, генерируемых через 2.5 пс вычислений, при всесторонней

деформации, равной по величине 4%. Поддерживаемая температура системы равна 900 К

Процесс миграции границы зерен наклона удалось активировать ударными волнами при более низких температурах расчетной ячейки, но для этого одним из необходимых условий является присутствие в ячейке вакансий. Так, например, если в одном из зерен имеется некоторое число вакансий, распределенных случайным образом (см. рис. 2. а), а во втором зерне генерируется ударная волна, то после прохождения волны наблюдается смещение вакансий по направлению к границе зерен, не смотря на то, что температура расчетной ячейки не достаточна для термоактивации диффузии.

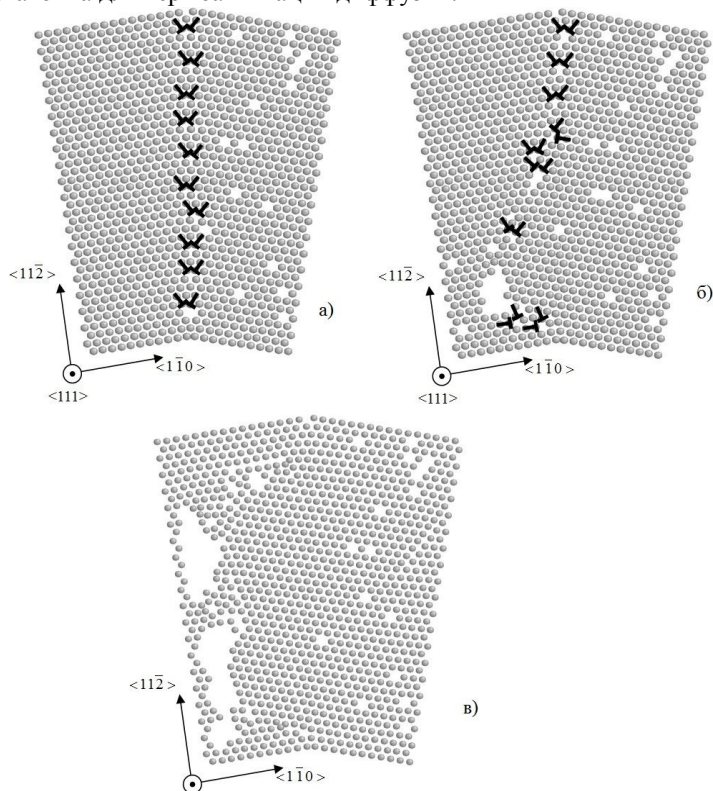


Рис.2. Фрагмент плоскости (111) расчетной ячейки, содержащей границу зерен с углом разориентации $\theta = 18^\circ$, в начале эксперимента (а) и после прохождения десяти ударных волн, генерируемых через 2.5

пс, при всесторонней деформации, равной по величине 3% (б) и 4% (в). Температура расчетной ячейки 300 К

В случае возбуждения нескольких волн, вакансии начинают оседать на зернограницных дислокациях с последующей делокализацией. Деформация всестороннего растяжения способствует направленному дрейфу вакансий и порообразованию в зернограницной области, что дополнительно облегчается тем, что свободный объем границы, обособляющий зерна друг от друга, создает растягивающие напряжения. Как показано в работе [12] наибольшей устойчивостью в зернограницной области обладает пора, пересекающая ядра дислокаций. Поэтому после генерации нескольких ударных волн и последующей релаксации структуры, наблюдалось перемещение зародыша поры по направлению к источнику волн, после чего экстраплоскость дислокации «прорастает» вглубь кристалла, что значительно упрощается в условиях растяжения. В дальнейшем начинает происходить скольжение дислокаций, удаленных от поры, стремящихся выстроиться в вертикальную стенку, в результате чего наблюдается выгибание границы. Последующее смещение группы освобожденных решеточных дислокаций вызывает локальную пластическую деформацию и образование удлиненного зерна (см. рис.2.б). Кроме того, при увеличении величины деформации, например до $\varepsilon = 4\%$, пора формируется на месте стыка зерен, и, смещаясь под действием создаваемых ударных волн, также способствует росту зерна (см. рис.2.в).

Результаты проведенного исследования могут быть использованы в радиационном материаловедении, наноинженерии, при ультразвуковой обработке материалов.

Список литературы

1. Овидько И.А. Теории роста зерен и методы его подавления в нанокристаллических и поликристаллических материалов // Materials Physics and Mechanics. 2009. V.8. №2. С.174-199.
2. Horita Z., Smith D.J., Furukawa M., Nemoto M., Valiev R.Z., Langdon T.G. High-resolution electron microscopy observations of grain boundary structures in submicrometer-grained Al-Mg alloys // Materials Science Forum. 1996. V.204-206. P.437-442.
3. Dey S., Mardinly J., Wang Y., Valdez J.A., Holesinger T.G., Uberuaga B.P., Ditto J.J., Drazin J.W., Castro R.H.R. Irradiation-induced grain growth and defect evolution in nanocrystalline zirconia with doped grain boundaries // Physical Chemistry Chemical Physics. 2016. V.18. №18. P.16921-16929.

4. Jian L., Liu J.C., Mayer J.W. Ar⁺ ion irradiation induced grain growth in Au and Pt thin films // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. 1989. V.36. №3. P.306-311.
5. Jhan R.J., Bristowe P.D. A molecular dynamics study of grain boundary migration without the participation of secondary grain boundary dislocations // Scripta Metallurgica et Materialia. 1990. V.24. №7. P.1313-1318.
6. Овчинников В.В. Радиационно-динамические эффекты. Возможности формирования уникальных структурных состояний и свойств конденсированных сред // Успехи физических наук. 2008. Т.178. №9. С.991-1001.
7. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Сосков А.А., Полетаев Г.М. Изучение структурных трансформаций нанопор цилиндрической формы в золоте методом молекулярной динамики в условиях термоактивации и воздействия звуковых и ударных волн // Физика твердого тела. 2015. Т.57. Вып.8. С.1521-1524.
8. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Смирнова М.В., Коваленко В.В., Захаров П.В. Влияние ударных послекаскадных волн на динамику краевой дислокации // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. Т.11. №4. С.461-469.
9. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д. Радиационно-динамические процессы в ГЦК кристаллах, сопровождающиеся высокоскоростным массопереносом. – Кемерово: Кузбассвуиздат, 2014 – 191 с.
10. Маркидонов А.В., Захаров П.В., Старостенков М.Д., Медведев Н.Н. Механизмы кооперативного поведения атомов в кристаллах. – Новокузнецк: филиал КузГТУ в г. Новокузнецке, 2016. – 219 с.
11. Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Tabakov P.Y. Splitting Vacancy Voids in the Grain Boundary Region by a Post-Cascade Shock Wave // Materials Physics and Mechanics. 2013. Vol.18. №2. P. 148-155.
12. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Павловская Е.П., Яшин А.В., Медведев Н.Н., Захаров П.В., Ситников А.А. Расщепление вакансионной поры в зернограницной области ударной послекаскадной волной // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2013. Т.10. №3. С. 443 – 453.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ПОСТАНОВКА ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЫ ПО ГРАФИЧЕСКОМУ ПРЕДСТАВЛЕНИЮ СПЕКТРОВ ВОЗБУЖДЕННОГО АТОМА ВОДОРОДА

Маулет М., Маулет А., Квеглис Л.Е., Иманжанова К.Т.,
Абылкалыкова Р.Б.

ВКГУ имени С. Аманжолова г. Усть-Каменогорск

E-mail: maulet_meruert@mail.ru

Введение

Целью данной работы было компьютерное моделирование и постановка лабораторной работы по графическому представлению спектров возбужденного атома водорода. Разработать программные обеспечения для построения волновых функций электрона в атоме водорода в состоянии возбуждения.

Из рис. 1 хорошо видно, что, не считая самых легких ядер, удельная энергия связи примерно постоянна и равна 8 МэВ/нуклон. Удельной энергией связи называют энергию связи, приходящуюся на один нуклон ядра [1-2].

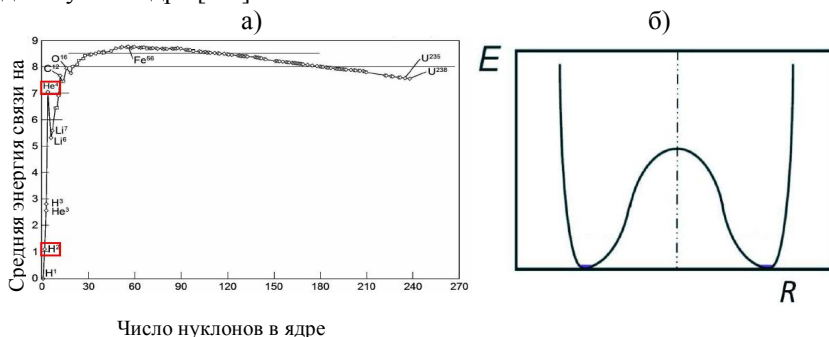


Рис. 1. Зависимость удельной энергии связи от числа нуклонов в ядре – а. Статистический принцип ослабления корреляции с расстоянием – б.

Сегодня мы знаем, что атомы водорода, имплантированные в металлы, не находятся более в основном состоянии. Облако свободных электронов в металле вынуждает электрон имплантированного атома занять возбужденное p – состояние. Это позволяет двум ядрам водорода разместиться в одной потенциальной нише кристаллической ячейки на очень близком расстоянии друг от друга [1].

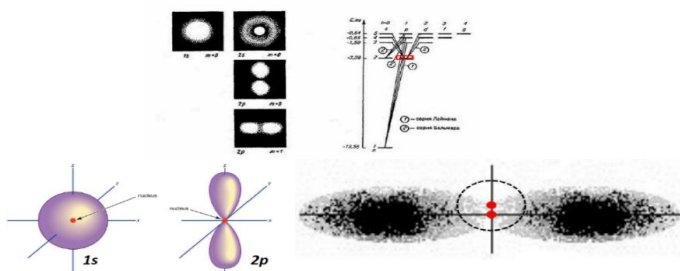


Рис. 2. Энергия Ридберга для атома водорода - а. Электронная орбиталь в 2p-состоянии больше не круглая - б. Орбитали атома водорода, в потенциальной нише кристаллической решетки - б.

Эксперименты на ускорителях показали, что величина экранирующего потенциала примесных атомов в металлических кристаллах достигает 300 эВ и более. Это означает, что в среде металлического кристалла примесные атомы водорода возбуждены и имеют не круговые, а эллиптические электронные орбиты, как это показано на рис. 2 а и б. В этом случае ядра этих атомов могут сближаться на расстояние, существенно меньше чем размер атома, без кулоновского отталкивания [1-2]. О такой возможности свидетельствуют функции радиального распределения электронной плотности для 2p - орбиталей по сравнению с 1s и 2s – орбиталями, что проиллюстрировано на рис. 3.

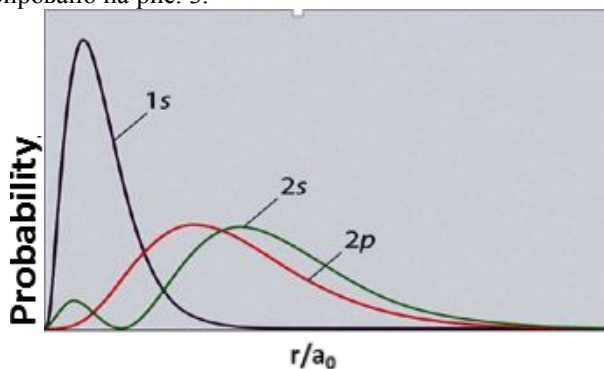


Рис. 3. Функция радиального распределения, $P(r)$ для 1s, 2s и 2p орбиталей по сравнению с расстоянием от ядра r .

Радиальная функция распределения вероятности $P(r)$, обеспечивает вероятность нахождения электрона на заданном расстоянии от ядра:

$$P(r) = r^2 R^2(r)$$

где $R(r)$ - радиальная составляющая волновой функции, а r - радиус.

$$R(r) = 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Zr}{a_0}}$$

Для 1s:

$$P(r) = r^2 \cdot \left(2 \left(\frac{Z}{\alpha_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{-Zr}{\alpha_0}} \right)^2$$

Для 2s:

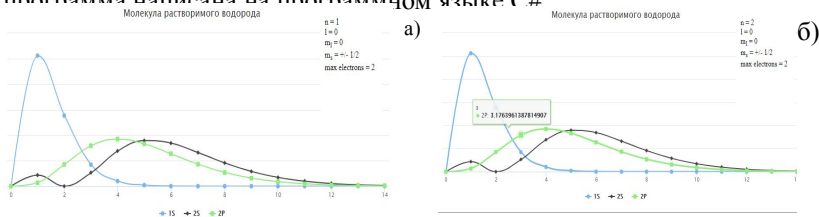
$$P(r) = r^2 \cdot \left(\frac{1}{\sqrt[3]{8}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{5}{2}} \left(2 - \frac{Zr}{a_0} \right) e^{\frac{-Zr}{a_0}} \right)^2$$

Для $2p$:

$$P(r) = r^2 \cdot \left(\frac{1}{24} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{5}{2}} \frac{r}{a_0} e^{\frac{-Zr}{a_0}} \right)^2$$

где Z - атомное число, r - радиальное расстояние между ядром и электроном, a_0 - радиус Бора ($5,29 \times 10^{-11}$ м) [3-4].

Используя выше указанные формулы нами были смоделированы радиальные функция вероятности для 1s, 2s и 2p орбиталей водорода в зависимости от расстоянием до ядра (рис. 4). Для моделирования процесса мы использовали программную среду Visual Studio 2015, программа написана на программном языке C#



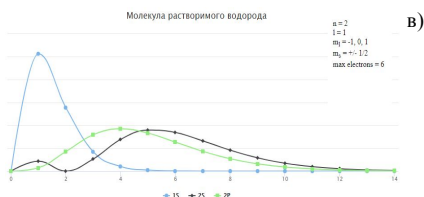


Рис. 4. Радиальная функция вероятности для 1s состояние – а. Радиальная функция вероятности для 2s состояния – в. Радиальная функция вероятности для 2p состояния – в.

Вывод

Разработано программное обеспечение для построения волновых функций электрона в атоме водорода.

Список литературы

1. Steven B. Krivit, Nuclear energy encyclopedia: science, technology, and applications (Wiley series on energy), 2011, Hoboken, New Jersey, USA
2. Цыганов Э.Н., Бавижев М.Д., Головатюк В.М., Дабагов С.Б., Лобастов С.П., механизм выделения энергии в реакции $D+D \rightarrow 4He^*$ в проводящих кристаллах (моделирование эксперимента), Журнал «Инженерная физика», №9, 2013г., С.3-17, Москва.
3. <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/quantum/hydwf.html#c3>
4. <http://open-inorganic-chemistry.digitalscholarship.utoronto.ca/node/41>

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТОЛЩИНЫ ТОНКОЙ УГЛЕРОДНОЙ ПЛЕНКИ ОПТИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Соломатин К.В., Елькина Е.А.

Алтайский государственный университет, г. Барнаул, Россия

E-mail: solomatin@phys.asu.ru

Введение

В последние годы в связи с большими прорывами в областях высоких технологий и микроэлектроники важное значение приобрели научные исследования в диапазоне размеров значительно менее 1 мкм, которые позволяют получать материалы с новыми и, нередко, неожиданными свойствами. Одно из направлений этих исследований – получение тонких пленок (нанопленок), являющихся уникальными материалами, сочетающими в себе не только свойства исходного

вещества, но и ряд отличительных физических и химических характеристик [1].

Углерод, аллотропные формы которого обладают целым спектром специфических особенностей, безусловно, относится к наиболее перспективным материалам. Свойства углеродных пленок, получаемых методами осаждения в вакууме, находят разнообразное применение в измерительной технике, приборостроении, изделиях электроники и микроэлектроники [2].

Качество наносимых материалов оценивается путем контроля таких параметров покрытий, как толщина, химический состав, пористость, плотность, адгезия, износостойкость, твердость, шероховатость, внутренние напряжения и др. Совокупность контролируемых параметров в каждом конкретном случае зависит от назначения покрытия, однако, для любого нанесенного слоя одним из важнейших параметров является его толщина [3].

Целью нашего исследования является получение тонких углеродных пленок и последующее измерение их толщины интерференционным методом.

Получение пленок

На базе кафедры общей и экспериментальной физики ФГБОУ ВО «АлтГУ» была создана установка, позволяющая изготавливать тонкие углеродные пленки лазерно-плазменным методом. Графитовая мишень фиксируется под колпаком, в рабочем объеме которого создается форвакуум. Затем, под действием лазерного излучения с поверхности мишени испаряется вещество. Полученный поток испаренного углерода осаждается на стеклянные подложки, расположенные в определенной конфигурации (рис.1) [4].

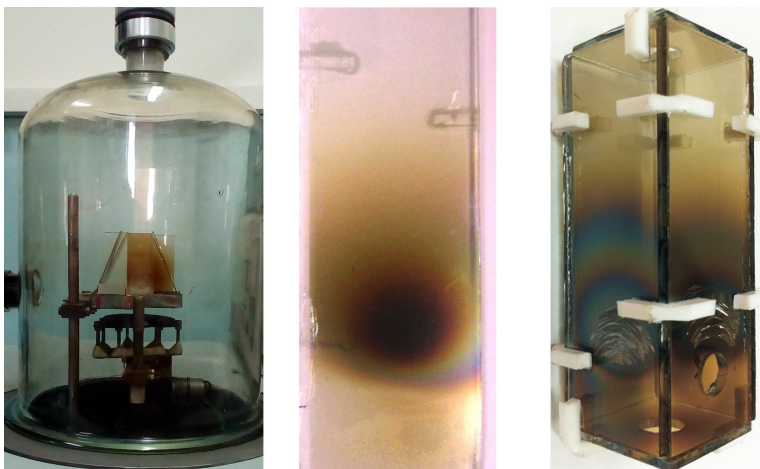


Рис.1. Вакуумный колпак (слева), стеклянная пластинка с тонкой углеродной пленкой (в центре), короб-уловитель (справа) с окнами для мишени и лазерного луча.

Ключевые элементы установки:

1) Импульсно-периодический твердотельный лазер (НТС 300) с активной областью YAG:Nd^{3+} работающий на длине волны $\lambda = 1064$ нм, с максимальной средней мощностью 300 Вт, максимальной мощностью импульса 12 кВт, длительностью импульса (0,2 – 20) мс, частотой повторения импульса до 200 Гц. Диаметр сфокусированного луча (0,3 – 2,0) мм. Данный источник лазерного излучения осуществляет лазерное испарение тугоплавких мишеней из графита.

2) Вакуумный универсальный пост ВУП-4 создающий разрежение в рабочем объеме с остаточным давлением 10^{-4} мм.рт.ст. Для создания вакуума в рабочем объеме данное устройство использует два типа насосов и работает с ними в строгой последовательности поочередного включения. Первым этапом откачки является создание технического вакуума с помощью форвакуумного насоса в рабочем объеме. По достижении уровня откачки рабочей зоны до 10^{-1} мм рт.ст. в процесс включается высоковакуумный диффузионный насос, позволяющий в короткое время создать высокий вакуум 10^{-5} мм рт.ст.

Полученная подложка с пленкой (показана на рис.1) содержит хорошо различимые в отраженном свете интерференционные структуры – плавные линии равной толщины.

Анализ различных участков углеродных пленок с помощью сканирующего зондового микроскопа АСМ «Интегра» показал, что

пленка имеет определенный поверхностный рельеф – однако локальные перепады высот на фоне толщины пленки незначительны. Сама же пленка имеет в пределах подложки разную толщину, которая изменяется достаточно плавно: она максимальна в центре напыления (где расстояние до мишени минимально) и спадает к краям, переходя вдали от центра в тонкий фоновый слой.

Определение толщины пленки

За основу способа измерения толщины нами был взят и затем несколько модифицирован фотометрический метод. Его сущность заключается в том, что на подложку с осаждаемой пленкой направляют луч монохроматического излучения и измеряют интенсивность излучения отраженного от образца или прошедшего через него. С ростом толщины пленки интенсивность отраженного (или прошедшего) света изменяется по периодическому закону, близкому к косинусоидальному (из-за интерференционных эффектов, возникающих в системе пленка–подложка). Экстремумы интенсивности соответствуют оптической толщине пленки, кратной четверти длины волны. Таким образом, задаваясь заранее числом экстремумов m , соответствующим требуемой толщине пленки (при напылении как тонких, так и относительно толстых пленок), можно прервать процесс нанесения пленки в момент наблюдения m -го экстремума. Для прозрачной пленки и прозрачной подложки коэффициент отражения описывается выражением вида [3]:

$$R = \frac{A + \cos \alpha}{B + \cos \alpha}, \quad (1)$$

где A и B – постоянные, определяемые через показатели преломления окружающей среды, пленки и подложки, $\alpha = 2kdn$ – изменение фазы луча при прохождении пленки, k – волновое число падающего излучения, n – показатель преломления пленки, d – толщина пленки.

Наибольшее развитие фотометрический метод получил в технологии нанесения многослойных оптических покрытий, так как он позволяет контролировать оптические, а не геометрические, толщины слоев покрытия, обеспечивая тем самым необходимые характеристики диэлектрических узкополосных интерференционных фильтров. Для контроля обычно используются как широкополосные источники света в сочетании с устройствами, выделяющими одну, две или несколько длин волн в отраженном или прошедшем через пленку оптическом потоке, так и узкополосные источники излучения (лазеры) с

неизбирательными фотоприемниками. Толщину пленок удастся контролировать до десятков нанометров с погрешностью менее 1%.

При падении света на оптически прозрачную пленку происходит наложение волн одного и того же источника света, отразившихся от передней и задней поверхности пленки (рис. 2) [5]. Вообще, интерференция является многолучевой: 0 – луч от источника, 1, 2, 3 и т.д. – лучи отраженные пленкой, лучи 1', 2', 3' и т.д. – лучи, прошедшие сквозь нее.



Рис. 2. Многолучевая интерференция в тонкой пленке

Данное явление и используют для определения толщины тонких пленок в фотометрическом методе. При отражении света от поверхностей пленки возникает геометрическая разность хода Δ между соответствующими отраженными волнами 1 и 2. Ее величина

$$\Delta = 2d\sqrt{n^2 - \sin^2 \alpha}, \quad (2)$$

где α – угол падения света на пленку, λ – длина волны. Кроме этого имеет место и дополнительная оптическая разность хода, возникающая из-за отражения луча 1 от оптически более плотной среды и равная $\lambda/2$. У луча 2 фаза при отражении на нижней поверхности пленки не изменяется (если подложка имеет показатель преломления меньше, чем пленка).

Попробуем использовать не монохроматический источник света или не несколько выделенных линий (как в фотометрическом методе), а сплошной и широкополосный. Если разность хода на некоторой длине волны кратна нечетному числу полуволен ($\lambda/2$), то будет наблюдаться интерференционный максимум, а если разность хода

кратна целому числу длин волн (или четному числу полуволен), то будет наблюдаться интерференционный минимум.

$$\Delta_{\max} = \left(p + \frac{1}{2} \right) \lambda_1, \quad (3)$$

$$\Delta_{\min} = q \lambda_2,$$

где p и q – целые числа, λ_1 и λ_2 – длины волн в спектре. Возможно присутствие нескольких минимумов и максимумов в спектре при относительно большой толщине (1 мкм и более).

В случае, когда угол падения света на пленку близок к 0° , формулу (2) можно представить как

$$\Delta = 2dn.$$

Тогда из формул (2-4) легко получается выражение для толщины пленки

$$d = \frac{\lambda_1 \lambda_2}{4n \cdot (\lambda_2 - \lambda_1)}. \quad (5)$$

Рассмотрим теперь несколько отраженных лучей. Амплитуда колебаний светового вектора (напряженности электрического поля) отраженного от поверхности пленки:

$$A_{omp} = A_1 + A_2 + A_3 + \dots \quad (6)$$

Пусть r – коэффициент отражения света по амплитуде, а τ – коэффициент пропускания. Для случая нормального падения на границу раздела вакууму (воздуха) и отражающей поверхности с показателем преломления n равен

$$r = \frac{n-1}{n+1}, \quad \tau = \frac{2}{n+1}. \quad (7)$$

Пренебрегая поглощением в пленке, амплитуда отраженных лучей (с учетом фазы в комплексной форме) будет равна:

$$A_1 = -rA_0, \quad A_2 = r\tau^2 A_0 \cdot e^{ik\Delta}, \quad A_3 = r^3\tau^2 A_0 \cdot e^{ik2\Delta}, \quad (8)$$

Знак « $\rightarrow$ » у первой величины определяется той самой дополнительной оптической разностью. Итоговая амплитуда

$$A_{omp} = rA_0 \cdot \left(-1 + \tau^2 e^{ik\Delta} + r^2 \tau^2 e^{2ik\Delta} + r^4 \tau^2 e^{3ik\Delta} + \dots \right) \quad (9)$$

Все слагаемые (кроме первого) можно объединить, если использовать формулу для бесконечной убывающей геометрической прогрессии:

$$A_{omp} = rA_0 \cdot \left(-1 + \frac{\tau^2 e^{ik\Delta}}{1 - r^2 e^{ik\Delta}} \right) = rA_0 \cdot \left(-1 + \frac{\tau^2}{e^{ik\Delta} - r} \right) \quad (10)$$

Для получения расчетной формулы и анализа остается перейти в последнем выражении (10) к действительной части, а также возвести в квадрат для получения интенсивности. Также сразу отметим, что расширить эту формулу для учета поглощения очень несложно – достаточно в показатель степени у экспоненты к фазе добавить слагаемое вида $(-\gamma d)$, поскольку затухание (γ – коэффициент затухания) прямо пропорционально пройденному лучом расстоянию (то есть фазе).

Регистрация прошедшего и отраженного света

Для измерения оптической прозрачности тонкой углеродной пленки с последующим определением толщины была собрана отдельная установка, основные части которой показаны на рисунке 3.

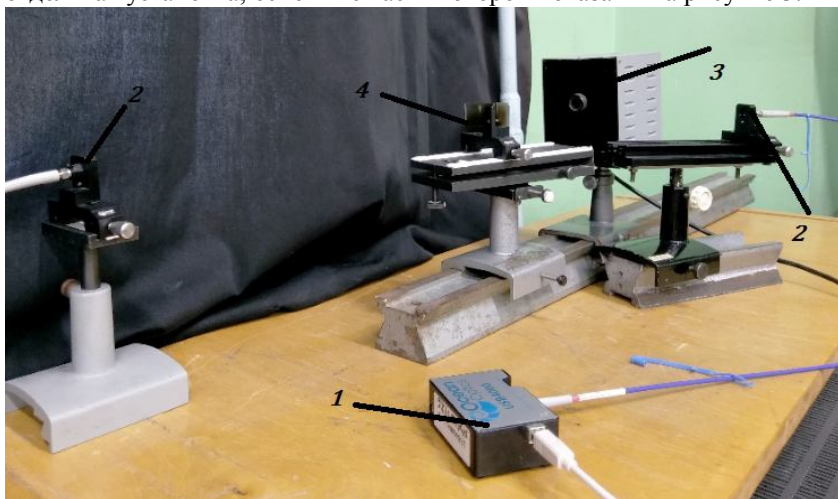


Рис. 3. Компоненты установки для измерения оптической прозрачности: 1 – оптоволоконный спектрометр USB4000, 2 – оптическое волокно с насадкой (микрообъектив), 3 – лампа накаливания; 4 – подвижный столик с закрепленной на нем углеродной пленкой

Пленка закреплена на столике так, чтобы угол падения света стремился к 0° . Свет, прошедший через пленку и отразившийся от нее, регистрируется спектрометром, а затем в цифровом формате поступает на персональный компьютер (два отдельных сигнала).

Малогабаритный волоконно-оптический спектрометр OceanOptics USB4000 содержит высококачественный детектор и надежную быстродействующую электронику. Спектрометр подходит для решения широкого круга аналитических задач, требующих высокого оптического разрешения и малого времени интегрирования, так как его спектральный диапазон располагается от ультрафиолетового до ближнего ИК. В ходе нашего эксперимента был выбран диапазон от 400 нм до 900 нм.

Спектрометр OceanOptics USB4000 соединяется с компьютером через порт USB, при подключении спектрометр получает питание от компьютера и не требует внешнего источника. Принцип работы спектрометра следующий: сохраняется опорный и темновой сигнал. Свет от источника взаимодействует с образцом, после чего собирается оптическим волокном и передается на выход спектрометра. Спектрометр измеряет количество света и преобразует полученный электрический сигнал в цифровую форму, далее цифровые данные передаются спектрометром программному обеспечению. Программа сравнивает полученный сигнал с опорным и отображает спектр.

В ходе измерений было получено множество данных от разных пленок. Наиболее типичная картина представлена на рисунке 4, где показана зависимость нормированной интенсивности от длины волны для выбранного небольшого участка пленки. Нормировка производилась на среднее значение из исследуемого диапазона.

По формулам (1), (5) и (10) полученные данные (рис.4) позволяют найти толщину пленки, что и было сделано. Для верификации показателя преломления применялись дополнительные исследования, поскольку за основу были взяты числовые значения из литературы [6], а эта величина очень чувствительна к структуре напыленной пленки.

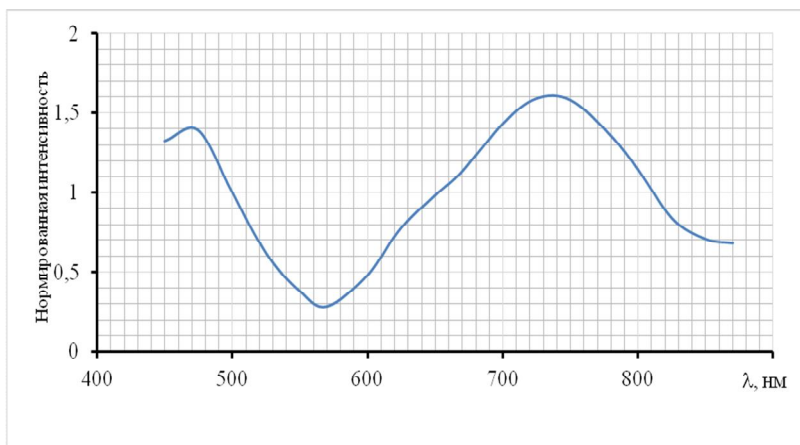


Рис.4. Зависимость нормированной интенсивности от длины волны

Для приведенного фрагмента измеренная толщина составила $d = (330 \pm 23)$ нм. Точность оказалась невысокой (7%), но возможно ее существенно увеличить, если использовать дополнительные математические методы.

В заключение хотим отметить, что толщина пленки может быть определена на данной установке при использовании заявленного спектрального интервала с хорошей точностью в диапазоне толщин $(0,05 \div 2,0)$ мкм.

Литература

1. Наноразмерные структуры: классификация, формирование и исследование / Булыгина Е. В. [и др.]. – Радиотехника. – 2006. – 89 с.
2. Чумаков, А. Н. Структура и оптические свойства углеродных пленок, полученных при многоимпульсном лазерном осаждении / А. Н. Чумаков [и др.] // Журнал прикладной спектроскопии. – 2012. – Т. 79, № 4. – С. 677-680.
3. Юдин, А. В. Анализ точностных характеристик фотометрического датчика толщины пленок / А. В. Юдин, С. Э. Семенова // Датчики и системы. – 2001. – № 11. – С. 44-46.
4. Соломатин, К.В. Получение тонких углеродных пленок путем конденсации пара, образующегося при лазерном воздействии на мишень / К.В. Соломатин, В.И. Ярцев // ЭФТЖ. – 2012. – Т. 7. – С. 37-41.
5. Ахманов, С.А. Физическая оптика: учебник. 2-е изд. / С.А. Ахманов, С.Ю. Никитин. – М.: Изд-во МГУ; Наука. – 2004. – 656с.

6. Бетехтин, А. Г. Курс минералогии : учебное пособие / А. Г. Бетехтин. – М.: КДУ, 2007. – 720с. : ил., табл.

**ТЕРМОУПРУГИЕ МАРТЕНСИТНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В
СПЛАВАХ НА ОСНОВЕ НИКЕЛИДА ТИТАНА,
ЛЕГИРОВАННОГО КОБАЛЬТОМ**

Клопотов А.А.^{1,2}, Потекаев А.И.², Марченко Е.С.²,
Байгонакова Г.А.²

*¹Томский государственный архитектурно-строительный
университет, Томск, Россия
E-mail: klopotovaa @tsuab.ru*

*²Национальный исследовательский Томский государственный
университет, Томск, Россия*

Введение

Одним из перспективных классов функциональных материалов являются сплавы, проявляющие эффект памяти формы (ЭПФ). Эти материалы в зависимости от температуры мартенситного превращения и физико-механических свойств находят широкое применение в различных конструкциях в технике и медицине [1-4].

В основе ЭПФ и сверхупругости лежит термоупругое мартенситное превращение (МП), открытое в 1949 Г.В. Курдюмовым с сотрудниками (Л. Г. Хандрос, И. Л. Арбузова и др.) в сплавах Cu-Al-Ni и Cu-Sn. Это открытие было зарегистрировано Госкомитетом СССР по делам изобретений и открытий: «установлено неизвестное ранее явление термоупругого равновесия при фазовых превращениях мартенситного типа, заключающееся в образовании упругих кристаллов мартенсита-границы которых в интервале температур превращения при изменении температуры и (или) поля напряжений перемещаются в сторону мартенситной или исходной фазы с одновременным обратимым изменением геометрической формы образующихся областей твердого тела».

Круг сплавов, которые обладают ЭПФ достаточно широк: Ag-Cd, In-Ti, Ni-Ti, TiNi-Fe, TiNi-Cu, TiNi-Nb, TiNi-Au, TiNi-Pd, TiNi-Pt, Fe-Pt, Mn-Cu, Fe-Mn-Si и др. Одними из наиболее перспективными сплавами в этом аспекте являются сплавы на основе никелида титана [4,5]. Было установлено, что легирование никелида титана разными элементами периодической системы даёт возможность регулирования свойств памяти формы в этих сплавах и их успешного и разнообразного применения. Описанию, изучению и теоретическому

обоснованию фазовых и структурных превращений в сплавах на основе никелида титана посвящено множество работ и обзоров [5-7].

В качестве примесного элемента в чистом Ni всегда присутствует кобальт. Поэтому исследования легирования кобальтом на МП и на ЭПФ в сплавах на основе никелида титана являются необходимыми с точки зрения выяснения особенностей влияния легирования этим компонентом на структурно-фазовые состояния в сплавах.

2. Материалы и методы исследования

Сплавы, легированные кобальтом, были получены плавкой в атмосфере инертного газа (аргон) в индукционной печи Из слитков были вырезаны пластины толщиной 1,1 мм, которые прошли гомогенизацию при температуре 850°C в течении 1 часа.

Из подготовленных полос были вырезаны на электроискровом станке образцы размером 1x1x45 мм. Состав сплавов основе никелида титана в области эквиатного состава $Ti_{49,95}Ni_{49,75}Mo_{0,3}$ при выплавке осуществляли при приготовлении лигатуры по трем схемам легирования. Первая схема легирования, когда атомами Co замещаются атомы Ni – это сплавы в области квазибинарного разреза TiNi–TiCo (рис. 1, прямая 1) ($Ti_{49,95}Ni_{49,75-x}Mo_{0,3}Co_x$). Вторая схема: атомами Co замещаются атомы Ti – это сплавы в области квазибинарного разреза TiNi–NiCo (рис. 1, прямая 2) ($Ti_{49,95-x}Ni_{49,75}Mo_{0,3}Co_x$). Третья схема: атомами Co замещаются атомы Ti и атомы Ni ($Ti_{49,95-x}Ni_{49,75-x}Mo_{0,3}Co_{2x}$). Концентрация атомов Co менялась от 0 до 3 ат.% с шагом 0,5 ат.%. Концентрация Mo была постоянная и равнялась 0,3 ат%. Рентгеноструктурные исследования образцов проводились на дифрактометре “XRD-6000” Shumadzu с использованием CuK_{α} -излучения.

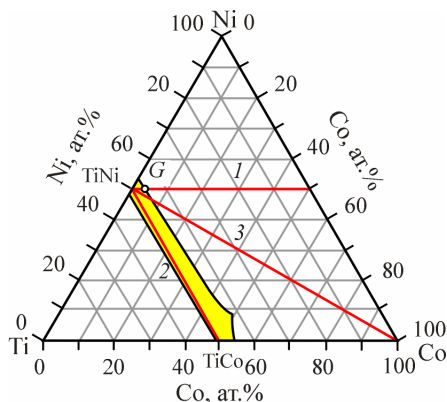


Рис. 1. Тройная диаграмма системы Ti-Ni-Co и три линии, отражающие схемы легирования бинарного сплава в области эквиатомного состава TiNi. Цветом выделена область структуры B2 при изотермическом сечении 900 °C

Стандартным четырехточечным методом [6,7] было проведено изучение температурных зависимостей кривых электросопротивления в исследуемых сплавах. Из анализа этих зависимостей были определены характеристические температуры МП.

3. Результаты и обсуждение

На основе рентгенофазового анализа установлено, что сплавы $Ti_{50}Ni_{49,7-x}Mo_{0,3}Co_x$ при комнатной температуре находятся в двухфазном состоянии. На дифрактограммах исследуемых сплавов обнаружены структурные линии от аустенитной фазы B2 и от вторичной фазы $Ti_2(Ni,Co)$. Причем объемная доля фазы $Ti_2(Ni,Co)$ не превышает 5% в исследуемых сплавах.

Рентгенографическим методом в сплавах $TiNi(Co,Mo)$ были получены концентрационные зависимости параметров решетки в фазе с B2 структурой, из которых были затем рассчитаны соответствующие зависимости атомных объемов (рис. 2).

Размеры атомов Ni и Co близки ($\Delta R = R_{Co} - R_{Ni} = 0,006$ нм) и следовательно, согласно закону Зена [5], и при замещении атомов Ni на атомы Co в фазе с B2 зависимость атомного объема от концентрации будет слабо меняться. Это явление действительно находит подтверждение на экспериментальной зависимости атомного объема от концентрации в сплавах $Ti_{50}Ni_{49,7-x}Mo_{0,3}Co_x$ в области малых концентраций легирующего компонента (до 2 ат.% Co) (рис. 2). В сплавах $Ti_{50}Ni_{49,7-x}Mo_{0,3}Co_x$ с более высокими значениями

легирующего компонентом Со (больше 2 ат.%) установлено значительное отклонение от закона Зена. Можно констатировать, что такое существенное отклонение от линейной зависимости атомного объема от концентрации обусловлено с существованием критического состава в сплавах $Ti_{50}Ni_{49,7-x}Mo_{0,3}Co_x$.

Таким образом, полученные данные позволяют выделить в сплавах $Ti_{50}Ni_{49,7-x}Mo_{0,3}Co_x$ две области (рис. 2, области I и II) с разной интенсивностью изменения структурно-фазовых состояний от концентрации легирующего элемента. В области I наблюдается слабое отклонение атомного объема от закона Зена от концентрации легирующего компонента. Здесь важно отметить корреляцию с концентрационным характером изменения характеристических температур МП: в этой же области концентраций легирующего элемента в $Ti_{50}Ni_{49,7-x}Mo_{0,3}Co_x$ наблюдается слабое понижение характеристических температур МП (рис. 2, а).

В сплавах с более высокой концентрацией легирующего элемента (рис. 2, область II), обнаружено более значительное отклонение атомного объема от закона Зена и более интенсивное понижение характеристических температур МП, чем в сплавах из области I.

Таким образом, установлено, что в сплавах $Ti_{50}Ni_{49,7-x}Mo_{0,3}Co_x$ существует предельная концентрация легирующего элемента (~ 2 ат.% Со), при достижении которой начинает заметно меняться характер межатомного взаимодействия.

Из сравнения концентрационных зависимостей атомных объемов в исследуемых сплавах видно, что в сплавах $Ti_{50}Ni_{49,7-x}Mo_{0,3}Co_x$ (рис. 2, б) интенсивность изменения атомных объемов от концентрации другая, чем в сплавах $Ti_{50-x}Ni_{49,7}Mo_{0,3}Co_x$.

Анализ полученных концентрационных зависимостей характеристических температур МП и атомных объемов в фазе В2 позволяет установить существование двух разных откликов на легирование Со сплавов на основе никелида титана от схемы легирования на зависимости характеристических температур МП и атомного объема в сплавах $Ti_{50}Ni_{49,7-x}Mo_{0,3}Co_x$ и $Ti_{50-x}Ni_{49,7}Mo_{0,3}Co_x$ от концентрации (рис. 2). Причем в сплавах на основе никелида титана при замещении атомов Ti на атомы Со способствует стабилизации высокотемпературной фазы В2. Это находит отражение в значительном снижении характеристических температур МП. Возможно, это связано с большим влиянием на межатомные взаимодействия при замещении атомов Ti на атомы Со, чем при

замещении атомов Ni на атомы Co. Это явление коррелирует с тем фактом, что размеры атомов Ti и Co значительно отличаются ($\Delta R = R_{Ti} - R_{Co} = 0,011$ нм) в отличие от разницы между размерами атомов Ni и Co ($\Delta R = R_{Co} - R_{Ni} = 0,0006$ нм). Таким образом, здесь необходимо принимать во внимание следующее обстоятельство, что размерный оказывает значительное влияние на стабильность кристаллической решетки фазы B2. Это может быть обусловлено либо геометрическим, либо энергетическим факторами. Геометрический фактор связывают с разницей атомных размеров легирующего элемента и растворителя. Поскольку, как уже было показано ранее, размерное

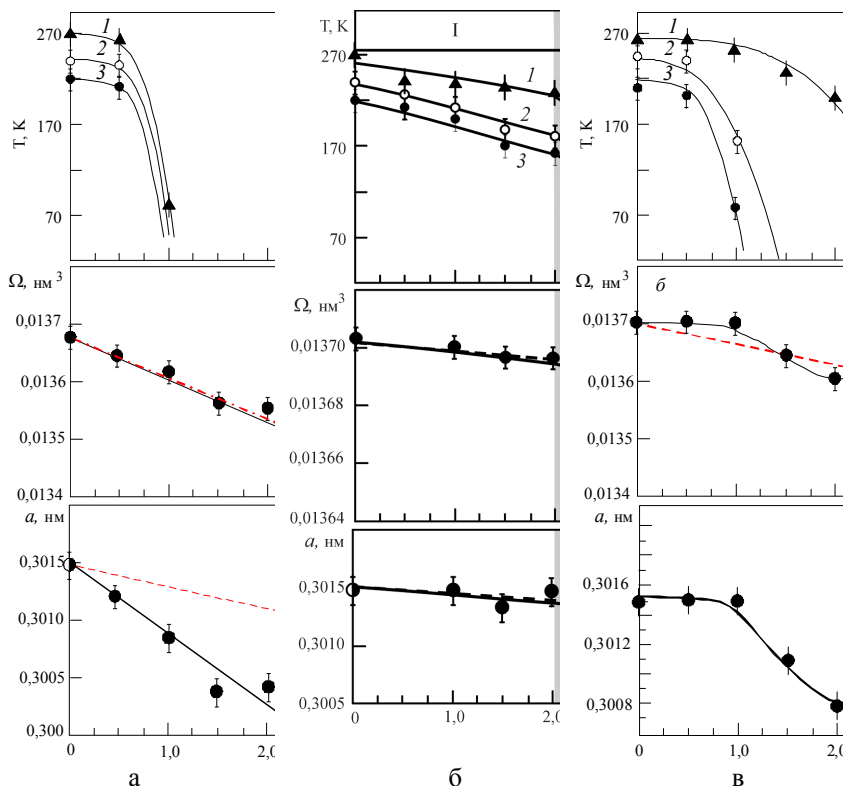


Рис. 2 Диаграммы мартенситных превращений в сплавах $Ti_{50-x}Ni_{49,7}Mo_{0,3}Co_x$, $Ti_{50}Ni_{49,7-x}Mo_{0,3}Co_x$ и $Ti_{50-x}Ni_{49,7-x}Mo_{0,3}Co_{2x}$ (температура T_R начала МП B2→R (1), температура M_H начала МП

R→B19 (2) и конца M_K МП R→B19 (3))(а), концентрационные зависимости атомного объема в фазе с B2 структурой (кривая 1—экспериментальная зависимость, полученная из экспериментальных данных параметра решетки фазы B2; линия 2— зависимость, полученная на основании закона Зена) (б) и зависимости параметра решетки в фазе B2 от концентрации (в).

несоответствие между атомами Ni и Co небольшое, то этот фактор не можно играть доминирующей роли в изменении коэффициента плотности упаковки. Поэтому можно сделать предположение о преобладающей роли на стабильность структурно-фазовых состояний энергетического фактора [5]. В пользу этого предположения свидетельствуют установленные разные функциональные зависимости изменения характеристических температур мартенситных превращений в зависимости от концентрации легирующего элемента в сплавах. Это явление обусловлено тем, что, что легирование кобальтом приводит к изменению энергии взаимодействия для пар атомов Ni-Ti и Ni-Ni. Это в свою очередь проявляется в существенном изменении энергии смещения в многокомпонентных сплавах на основе никелида титана [5]. Здесь следует еще раз отметить, что меняя схемы легирования и величину концентрации легирующим элементом Co можно менять как температурные интервалы МП, так и механические свойства сплавов на основе никелида титана [4]. Выявленная разная интенсивность изменения атомных объемов в фазе B2 от схемы легирования сплавов на основе никелида титана отражает включение разных вкладов в изменение сил межатомного взаимодействия [8].

4. Заключение

На основании проведенных исследований можно сделать следующие выводы:

1. Получена концентрационная зависимость параметров элементарной ячейки в фазе B2 для сплавов $Ti_{50}Ni_{49,7-x}Mo_{0,3}Co_x$, $Ti_{50-x}Ni_{49,7}Mo_{0,3}Co_x$ и $Ti_{50-x}Ni_{49,7-x}Mo_{0,3}Co_{2x}$.

4. Установлен разный характер изменения атомного объема с ростом концентрации легирующего элемента в сплавах $Ti_{50}Ni_{49,7-x}Mo_{0,3}Co_x$, $Ti_{50-x}Ni_{49,7}Mo_{0,3}Co_x$ и $Ti_{50-x}Ni_{49,7-x}Mo_{0,3}Co_{2x}$.

5. На основе анализа проведенных исследований показано, что концентрационная схема легирования сплавов на основе кобальта оказывает совершенно разное влияние как на структурно-фазовые состояния, так и на температурные интервалы мартенситных

превращений в многокомпонентных сплавах на основе никелида титана, легированных кобальтом и молибденом: $Ti_{50}Ni_{49,7-x}Mo_{0,3}Co_x$, $Ti_{50-x}Ni_{49,7}Mo_{0,3}Co_x$ и $Ti_{50-x}Ni_{49,7-x}Mo_{0,3}Co_{2x}$.

Литература

1. Тихонов. С., Герасимов А.П., Прохорова И.И. Применение эффекта памяти формы в современном машиностроении. М.: Машиностроение. 1981 – 80 с.
2. Цхай Э.Б., Клопотов А.А., Волокитин Г.Г. Применение сплавов с эффектами памяти формы для усиления затяжки резьбового соединения //Современные проблемы теории машин: Материалы II международной заочной научно-практической конференции / НОЦ «МС». Новокузнецк: Издательский центр СибГИУ. 2014. – С.157-161.
3. Цхай Э.Б., Волокитин Г.Г., Клопотов А.А. Особенности работы тарельчатых пружин из сплавов с эффектами памяти формы //Сборник трудов Международной научно-практической конференции «Актуальные проблемы современного машиностроения». Юргинский технологический институт. Томск: ТПУ. 2014. С.397-401.
4. Гюнтер С.В., Дамбаев Г.Ц., Гюнтер В.Э., Ходоренко В.Н., Марченко Е.С., Ясенчук Ю.Ф., Кокорев О.В., Кафтаранова М.И., Аникеев С.Г., Артюхова Н.В., Байгонакова Г.А., Клопотов А.А. и др. Новые технологии создания медицинских материалов, имплантатов и аппаратов на основе никелида титана с использованием инфракрасного излучения. - Томск: ООО «НПП и МИЦ». 2017. – 234 с.
5. Потекаев А.И, Клопотов А.А., Козлов Э.В., Кулагина В.В. Слабоустойчивые предпереходные структуры в никелиде титана. Томск: НТЛ, 2004. – 296 с.
6. Гюнтер В.Э., Ходоренко В.Н., Ясенчук Ю.Ф. и др. Никелид титана. Медицинский материал нового поколения. - Томск: МИЦ. 2006. – 296 с.
7. Пушин В.Г., Кондратьев В.В., Хачин В.Н. Предпереходные явления и мартенситные превращения. АН УРО. Екатеринбург. 1998. – 320 с.
8. Маделунг О. Физика твердого тела. Локализованные состояния. М.: Мир. 1985.– 320 с.

**ИЗУЧЕНИЕ МАКРОПЛАСТИЧЕСКОГО ТЕЧЕНИЯ В
ОБЛАСТИ СВАРНОГО ШВА ТИТАНОВОГО СПЛАВА ВТ1-0 НА
ПОВЕРХНОСТИ ОБРАЗЦОВ ПРИ ДЕФОРМАЦИИ
РАСТЯЖЕНИЕМ МЕТОДОМ КОРРЕЛЯЦИИ ЦИФРОВЫХ
ИЗОБРАЖЕНИЙ**

Устинов А.М.¹, Курган К.А.¹, Клопотов А.А.^{1,2}, Потекаев А.И.²,
Абзаев Ю. А.¹, Зеленков А. А.³

¹*Томский государственный архитектурно-строительный
университет, Томск, Россия*

E-mail: klopotova@tsuab.ru

²*Национальный исследовательский Томский государственный
университет, Томск, Россия*

³*Национальный исследовательский Томский политехнический
университет, Томск, Россия*

1. Введение

В настоящее время титановые сплавы благодаря высокой прочности и малой удельной массе находят широкое применение в авиационной и космической технике, ядерной энергетике других отраслях. При этом при изготовлении конечных изделий с применением титановых сплавов часто используют сварные соединения. Вопросам получения сварных соединений титановых сплавов, вследствие их сложной свариваемости, уделяется большое внимание [1]. При этом в литературе достаточно много внимания уделено особенностям в изменении структурно-фазовых состояний в области сварного шва в титановых сплавах [2,3]. Кроме того, чтобы необходимо также иметь полную картину об эволюции деформационных полей при внешних механических воздействиях на элементы конструкций в области сварного шва. Поскольку данные об эволюции распределений деформационных полей необходимы для уточнения теории прочности сварных швов, что позволит наиболее полно её использовать при конструировании несущей способности сварных соединений. Здесь также важно отметить, что в процессе сварки происходит деформация сварного соединения. Это явление обусловлено расширением и сжатием металла при образовании сварочной ванны в процессе сварки.

Цель данной работы на основе экспериментальных исследований деформации при растяжении изучить особенности *in situ* полей смещений при пластической деформации на поверхности

плоских образцов из титанового сплава BT1-0 в микрокристаллическом состоянии со сварным швом и без него.

2. Методика эксперимента и материалы

Деформационные исследования проводили растяжением плоских образцов на приборе «INSTRON 3386». Одновременно в процессе деформации проводили исследование эволюции полей смещений в приповерхностных слоях при помощи оптической измерительной системы VIC-3D [4]. Схема проведения эксперимента представлена на рис. 1. Для того, чтобы фиксировать эволюцию деформационных полей в процессе увеличения приложенной нагрузки на поверхности образцов была создана спекл-структура [5].

Поля перемещений представляют собой проекции смещений локальных участков поверхности вдоль оси OX - «поперечная деформация», вдоль оси OY - «продольная деформация» и вдоль оси OZ - «поперечная деформация». Распределение полей смещений на поверхности получено в результате объединения изменений в микрообласти. В процессе испытаний, данные полученные при помощи программы VicSnap, затем были обработаны с использованием программы Vic-3D [6]. В результате были вычислены геометрические параметры поверхности (координаты X, Y, Z для каждой анализируемой точки). Относительные деформации ε_{xx} направлены по оси X и по оси Y деформации ε_{yy} .

Для испытаний на деформационное растяжение были использованы образцы из титанового сплава BT1-0 в микрокристаллическом состоянии с размерами $60 \times 9 \times 1,8$.

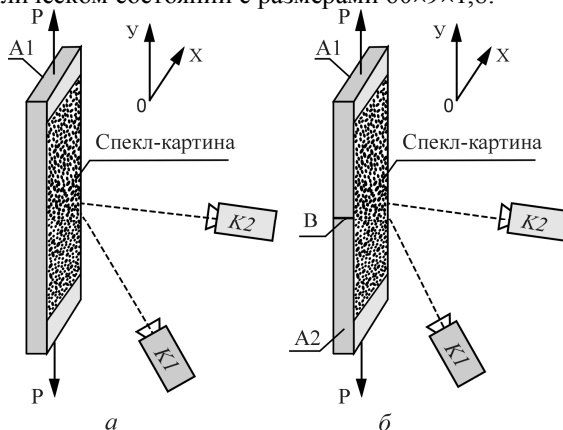


Рис. 1. Схематическое представление эксперимента при деформации растяжением образцов без сварного шва (а) и со

сварным швом (δ) с регистрацией полей смещений с помощью спекл-поверхности. К1 и К2 – цифровые камеры; Р – прикладываемая нагрузка; А1 и А2 – титановые пластины; В – сварной шов

Электронно-лучевую сварку двух титановых пластин проводили в вакуумной камере на промышленной установке ЭЛС-0,5-6. В установке использована электронная пушка с плазменным катодом, с ускоряющим напряжением (U) 28 кВ, током пучка (I_n) 35 мА, током фокусирующей катушки до 551 мА. Скоростью перемещения луча составляла 25 мм/с. Диаметр электронного пучка в зоне сварки ~ 0,5 мм с максимальной мощностью 6 кВт. Фиксацию двух пластин в процессе сварки осуществляли при помощи оригинальной оснастки, обеспечивающей свободное размещение свариваемой зоны.

3. Результаты и обсуждение

На рис. 2 приведена кривая нагружения при растяжении образца сплава ВТ1-0 в микрокристаллическом состоянии в координатах «напряжение – относительная деформация» ($\sigma=f(\epsilon)$). Представлена только начальная часть деформационной кривой. Приведенная на рис. 2 деформационная кривая совпадает с литературными данными [7]. На деформационной кривой выделяют характерные участки, которые

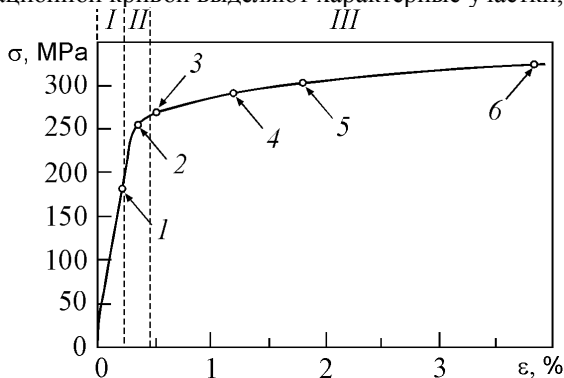
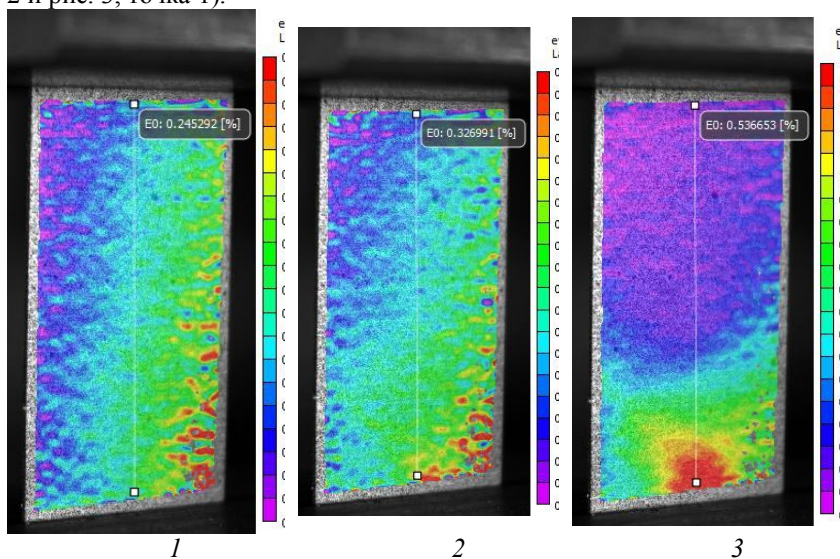


Рис. 2. Диаграмма нагружения $\sigma=f(\epsilon)$ сплава ВТ1-0 в микрокристаллическом состоянии. Арабские цифры соответствуют положению на кривой картинам распределений деформационных полей на поверхности образца (рис. 3). I – стадия упругой деформации; II – переходная стадия; III – стадия пластической деформации соответствуют различным стадиям [8, 9].

На рис. 2 на деформационной кривой выделяем три стадии. Стадия I имеет линейный характер и отражает упругую деформацию

между приложенной нагрузкой и деформацией. Далее следует переходная стадия (стадия II). Эта стадия соответствует переходу от упругой деформации к пластической стадии (стадия III). На этой стадии коэффициент упрочнения имеет невысокие значения, характерные для титановых сплавов [10].

На рис. 3 представлены картины распределения деформационных полей на приповерхностном слое пластины титанового сплава на разных стадиях деформационной кривой $\sigma=f(\epsilon)$. На приведенных картинах на начальной стадии I хорошо виден не симметричный характер распределения деформационных полей относительно вертикальной оси (рис. 3, картина 1). Это отражает наличие градиента в распределении деформационных полей в горизонтальном направлении. Величина деформации в локальной области в вдоль вертикальной оси в центральной части пластины близка к значению деформации на диаграмме нагружения $\sigma=f(\epsilon)$ (рис. 2 и рис. 3, точка 1).



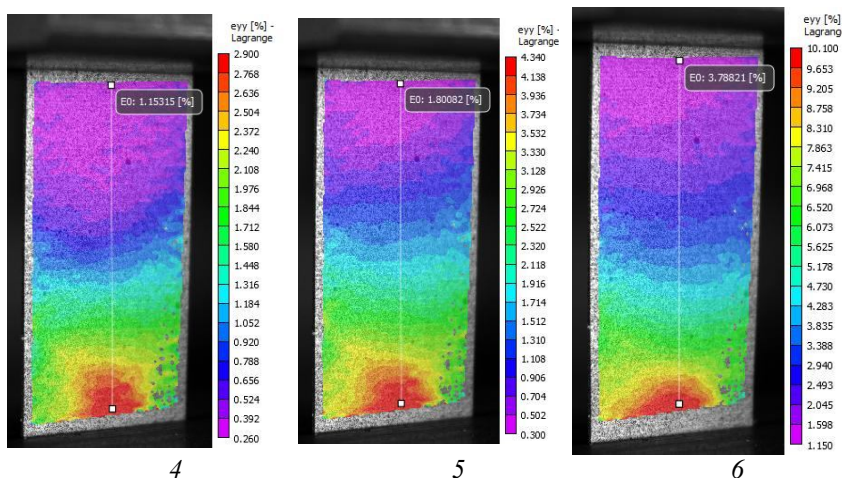


Рис. 3. Картины распределений вертикальных относительных деформаций ϵ_{yy} поверхности плоского титанового сплава BT1-0 в микрокристаллическом состоянии. Цифры показывают на диаграмме на рис. 2 соответствующие деформационно-напряженные состояния образца при испытании

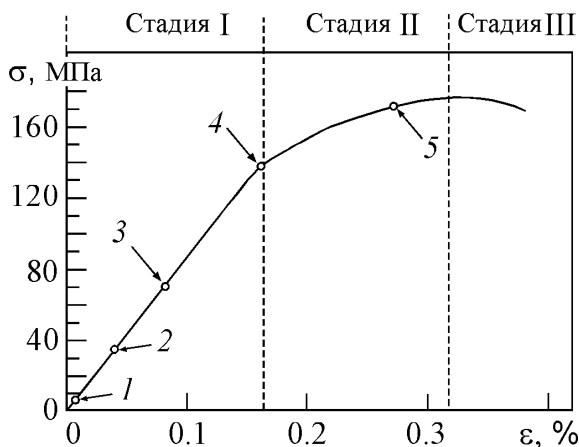


Рис. 4. Диаграмма нагружения $\sigma=f(\epsilon)$ сплава BT1-0 со сварным швом. Арабские цифры соответствуют положению на кривой картинам распределений деформационных полей на поверхности

образца (рис. 5). *I* – стадия упругой деформации; *II* – переходная стадия; *III* – стадия пластической деформации

На зависимости $\sigma=f(\epsilon)$ между упругой стадий *I* и пластической стадией *III* существует переходная стадия *II* (рис. 3). Согласно литературным данным [8,11] для стадии *II* характерно существование одновременно пластически деформированных и упруго деформированных зерен. Это явление проявляется на картине распределений локальных очагов пластической деформаций и локальных упругодеформированных участков на поверхности пластины титанового сплава ВТ1-0. Переход к *III* стадии сопровождается ростом доли пластически деформированных зерен с ростом приложенного напряжения, а доля упруго деформированных зерен уменьшается (рис. 3, картина 2 и 3). При этом наблюдается увеличение разницы между значениями деформации в деформированных областях с минимальной и максимальными значениями (рис. 3, картины 2-6).

На *III* стадии исчезает градиент распределения деформационных полей в горизонтальном направлении и наблюдается рост градиента распределений деформационных полей вдоль вертикальной оси образца. На приведенных картинах хорошо видно, что в нижней области образца, примыкающей к нижнему захвату, на поверхности титановой пластины в локализованной области начинают интенсивно расти значения пластической деформации. При этом эта область по своим размерам практически не меняется (рис. 3, картины 3-6).

На рис. 4 приведена диаграмма нагружения образца, полученного сваркой из двух пластин титанового сплава ВТ1-0. Такое значительное различие деформационных кривых $\sigma=f(\epsilon)$ между целым образцом со сварным швом отражает тот факт, что физическая природа механизмов деформации этих двух образцов разная. Это явление хорошо отражают картины полей смещений на приповерхностном слое исследуемых образцов (рис. 3 и 5) при деформации растяжением.

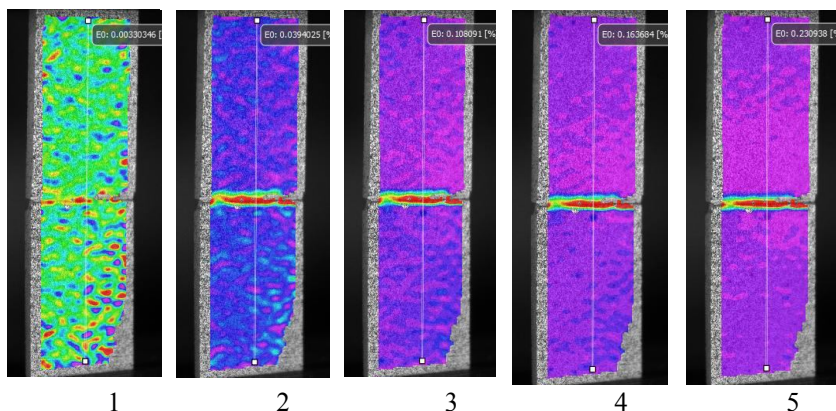


Рис. 5. Картины распределений вертикальных относительных деформаций ϵ_{yy} на поверхности плоского титанового сплава BT1-0 в со сварным швом. Цифры показывают на диаграмме на рис. 4 соответствующие деформационно-напряженные состояния образца при испытании

На рис. 5 представлены картины полей смещений на приповерхностном слое пластинчатого образца титанового сплава BT1-0 в со сварным швом на разных стадиях деформационной кривой $\sigma=f(\epsilon)$. На приведенных картинах распределения деформационных полей на приповерхностных слоях образца видно практически однородное распределение деформации по площади двух пластин на макро- и мезоуровнях наблюдается. При этом в ходе процесса

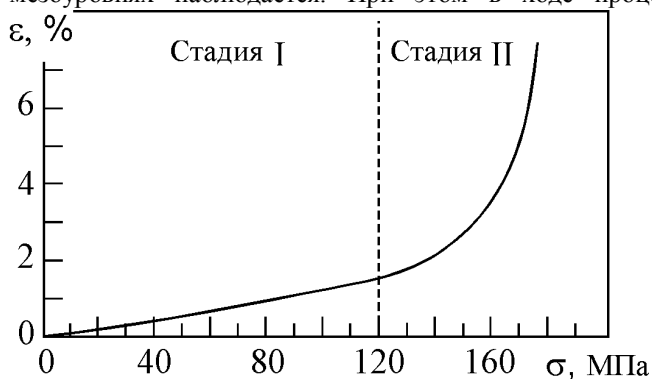


Рис. 6. Зависимость максимальной величины деформации в области сварного шва от приложенного напряжения при растяжении сплава BT1-0 со сварным швом.

деформирования, начиная со стадии I, в области сварного шва начинает образовываться очаг пластической деформации. Максимальная величина пластической деформации на стадии I в области сварного шва начинает линейно увеличиваться с ростом приложенного напряжения (рис. 6). Переход к стадии II сопровождается нелинейным параболическим ростом максимальной величины деформации в области сварного шва. Здесь важно отметить, что как только произошло образование очага пластической деформации в области сварного, так пластическая деформация в сварном шве на всех стадиях значительно превышает деформацию всего образца. При площади очага пластической деформации в области сварного шва начиная с деформации 0,05% практически не увеличивается, а растет только величина пластической деформации.

4. Заключение

На основе исследований полей смещений в приповерхностных слоях плоских образцов из титанового сплава BT1-0 в микрокристаллическом состоянии со сварным швом при помощи оптической измерительной системы VIC-3D установлен разный функциональный характер изменения максимальной величины пластической деформации в области сварного шва от приложенного напряжения $\varepsilon_{\max}=f(\sigma)$: на стадии I эта функциональная зависимость является линейной $\varepsilon_{\max}=k\sigma$; на стадии II – параболической $\varepsilon_{\max}=\sigma_0+k\sigma^2$.

Литература

1. Лясоцкая В.С. Термическая обработка сварных соединений титановых сплавов. М.:Экомет, 2003. 352 с.
2. Клименов В.А., Гнусов С.Ф., Клопотов А.А. и др. Структура и свойства микрокристаллического и субмикрокристаллического титанового сплава BT1-0 в области шва при электронно-лучевой сварке// Известия ВУЗов. Физика. 2017. Т.60. №6. С.60-71.
3. Danieison P., Wilson R., Alman D. Microstructure of titanium welds//Journal of Materialography. 2004. V.3. P.2-7.
4. Д.Г. Копаница, А.М. Устинов, А.И. Потекаев, А.А. Клопотов, Е.С. Марченко. Изменения напряженно-деформированных состояний приповерхностных слоев стали в процессе нагружения//Известия ВУЗов. Физика. 2017. Т.60, №9. С.105-113.
5. Устинов А.М., Клопотов А.А., Потекаев А.И., Абзаев Ю.А., Плевков В.С. Экспериментальное исследование напряженно-деформированного состояния... поверхностных слоев углепластика при осевом растяжении методом корреляции цифровых

изображений // Известия Алтайского государственного университета. 2018. №1. С. 58-69.

6. Федоров В.С., Копаница Д.Г., Клопотов А.А. и др. Экспериментальные исследования упруго-пластической деформации клеевых соединений методом корреляции цифровых изображений // Вестник ТГАСУ. №2, 2017. С.79-97.

7. Ionova N.A. Investigation of strain localization in titanium VT1-0 after electrolytic hydrogenation. Prospects of fundamental sciences development. XII International Conference of students and young scientists. 2015. Tomsk: TPU. P. 115-117.

8. Zuev L.B. On the waves of plastic flow localization in pure metals and alloys // Ann. Phys. 2007. V. 16. N 4 p. 286-310.

9. Ustinov A., Kopanitsa D., Abzaev Yu., Klopotov A., Koshko B., Kopanitsa G. Study of deformations evolution near-surface layers of adhesive joints // AIP Conference Proceedings. 2017. N 1800. N 1. P. 040007 (1-6).

10. Разоренов С.В., Савиных А.С., Зарецкий Е.Б., Капель Г.И., Колобов Ю.Р. Влияние предварительного деформационного упрочнения на напряжение течения при ударном сжатии титана и титанового сплава. Физика твердого тела. 2005. Т. 47. Вып. 4. С.639-646.

11. Gilman J.J. Micromechanics of shear banding // Mech. Mater. 1994. V. 17, N 1. P. 83-94.

ОБРАБОТКА ТЛЕЮЩИМ РАЗРЯДОМ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЙ МЕТОД УЛУЧШЕНИЯ ЭКСПЛУАТАЦИОННЫХ СВОЙСТВ ИНСТРУМЕНТАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Рабыко М.А., Елисеева А.Н., Верещак С.В., Пищик В.И., Обидина О.В.
ГУВПО «Белорусско-Российский университет», Могилев, Беларусь
E-mail: obidina@tut.by

В статье рассматриваются результаты исследований влияния обработки тлеющим разрядом на твердость и износостойкость быстрорежущих сталей и твердых сплавов. В рамках представленных исследований образцы подвергались обработке в среде остаточных газов при напряжении 0,5...3 кВ в течение 15...45 минут. Измерение твердости рабочей поверхности образцов осуществлялось по методу Виккерса. Исследование влияния обработки в тлеющем разряде на износостойкость быстрорежущих сталей производилось на модернизированной установке, на базе серийной машины СМТ-1 для

испытания материалов на трение и износ. Влияние обработки твердых сплавов в тлеющем разряде на их износостойкость исследовалось на фрезерном станке при фрезеровании брусков из различных материалов. В ходе проведенных исследований было выявлено увеличение твердости и износостойкости быстрорежущих сталей и твердых сплавов.

Введение

В настоящее время в машиностроении остается ряд нерешенных вопросов в сфере улучшения различных характеристик материалов, в том числе и эксплуатационных. Во многом это связано с ошибками в определении режимов обработки материалов, с неправильным выбором материала в качестве обрабатывающего инструмента. К тому же присутствуют и экономические показатели, влияющие на цену материалов. Совокупность данных причин способствует проведению испытаний разной сложности с целью улучшения свойств материалов отечественного производства. Обработка плазмой тлеющего разряда является одним из перспективных направлений в модификации материалов. Отличительной особенностью данной обработки можно назвать универсальность самого способа, высокую степень производительности, а также возможность обрабатывать значительно большие площади изделия. Плазменная обработка не нуждается в использовании жидких растворов, вследствие чего является экологически чистой и энергоемкой.

Методика исследований

В качестве объектов исследования использовались образцы из быстрорежущей стали Р6М5 и Р9, а также образцы из твердого сплава ВК8 и ТН20.

Быстрорежущие стали применяют для изготовления режущего инструмента, работающего при высоких скоростях, усилиях и температурах резания. Для быстрорежущих сталей характерны высокая износостойкость, теплостойкость, вязкость и прочность. Сталь Р9 используют для изготовления инструментов простой формы, не требующих большого объема шлифовки, для обработки обычных конструкционных материалов. Сталь Р6М5 применяется для изготовления всех видов режущего инструмента, используемого при обработке углеродистых легированных конструкционных сталей, резьбонарезного инструмента, инструмента, работающего с ударными нагрузками и в условиях повышенных температур. Данная сталь прекрасно держит заточку, гораздо прочнее нержавеющей, прекрасно

справляется с ударными нагрузками, имеет повышенную вязкость, хорошее сопротивление износу и хорошую шлифуемость.

В работе также исследовались образцы многогранных неперетачиваемых пластин из твердых сплавов ВК8 (ГОСТ 3882 – 84) и ТН-20 (ГОСТ 26530 – 85).

Для исследований применялась установка для вакуумно-плазменной обработки, которая интенсивно используется в Белорусско-Российском университете для улучшения эксплуатационных свойств материалов. Сущность способа вакуумного модифицирования металлов и сплавов заключается в том, что изделия помещаются в вакуумную камеру на катод. Из камеры откачивается воздух и включается цепь питания источника высокого напряжения, благодаря чему между электродами создается разность потенциалов, величину которой устанавливают в пределах 0,5...3 кВ. В результате этого возникает пробой разрядного промежутка с возникновением тлеющего разряда. Далее, управляя источником высокого напряжения и вакуумными клапанами, устанавливается давление остаточных газов, напряжение горения разряда и плотность тока в необходимых пределах. Температура в камере в течение плазменной обработки контролируется и не превышает 343 К [1]. По истечении времени обработки изделий в плазме тлеющего разряда, высокое напряжение выключается. После чего производится напуск воздуха в камеру, а затем обработанные изделия извлекаются.

Измерение микротвердости поверхности быстрорежущей стали по методу Виккерса на приборе ПМТ-3 производилось согласно требованиям методики, приведенной в [2], путем вдавливания алмазного наконечника в форме правильной четырехгранной пирамиды с углом при вершине между противоположными гранями 136° в образец под действием нагрузки в 1 Н, приложенной в течение 10 с. и измерения диагоналей отпечатка, оставшегося на поверхности после снятия нагрузки. При изменении твердости, для получения наиболее достоверных результатов, ее определение проводили по результатам измерения 20 отпечатков. В результате проведенных испытаний была выбрана нагрузка вдавливания алмазного наконечника в пределах 0,98 Н. Для обеспечения возможности измерения микротвердости, исследуемые поверхности образцов подвергались шлифовке с последующей их полировкой. Измерение твердости сплавов ВК8 и ТН-20 осуществлялось по методу Виккерса на приборе ИТ 5010 [2].

Исследование влияния обработки в тлеющем разряде на износостойкость быстрорежущей стали производилось на модернизированной установке, на базе серийной машины СМТ-1 для испытания материалов на трение и износ. Испытания материалов на износ осуществлялись в режиме сухого трения в паре с контртелом, изготовленным из алмазного шлифовального круга. Сверху на образец прикладывали нагрузку. Такая схема испытаний позволяет имитировать пары трения, подобные реальным. В процессе испытаний фиксировалась скорость вращения вала и момент трения. Износ определялся по потере образцами массы, путем взвешивания образцов на аналитических весах.

Исследование влияния обработки твердосплавных инструментов в тлеющем разряде на их работоспособность производилось на фрезерном станке при фрезеровании брусков из различных материалов. В качестве инструмента использовалась однозубая торцовая фреза, оснащенная многогранной неперетачиваемой пластиной из твердого сплава. Использование однозубой торцевой фрезы позволило исключить влияние биения зубьев на закономерности размерного износа [3]. Измерение износа по задней поверхности инструмента осуществлялось при прохождении зубом фрезы равных участков до достижения предельного износа, равного 0,7 мм.

Результаты исследований и их обсуждение

В ходе проведенных исследований было получено, что для образцов из стали Р9 максимальное приращение твердости составляет 20%, а износостойкость увеличивается в 1,7 раза. Максимальные значения для приращения твердости и износостойкости получены при обработке образцов стали Р9 с напряжением горения разряда 2 кВ, плотностью тока 0,25 А/м² в течение 15 минут [4].

Анализируя результаты, полученные для образцов из стали Р6М5, можно сделать вывод о том, что максимальное приращение твердости составляет 12% для режима обработки с напряжением горения разряда 0,8 кВ, плотностью тока 0,25 А/м² в течение 30 минут [5].

Максимальное увеличение износостойкости до 3 раз наблюдается для образцов стали Р6М5, подвергнутых обработке при напряжении горения разряда 2 кВ, плотности тока 0,375 А/м² в течение 15 минут.

Плазменная обработка приводит к повышению поверхностной твердости сплавов ВК8 и ТН-20 в среднем на 10...15 %. Максимальное приращение твердости для твердого сплава ВК8 зафиксировано при

обработке с напряжением горения разряда 2 кВ, плотностью тока 0,25 А/м² в течение 30 минут. Для сплава ТН-20 максимальное приращение твердости наблюдается при обработке с напряжением горения 2 кВ, плотностью 0,13 А/м² в течение 45 минут.

Обработка твердых сплавов ВК8 и ТН-20 тлеющим разрядом с определенными технологическими характеристиками приводит к повышению их износостойкости при различных видах лезвийной обработки всего спектра материалов от 2 до 3 раз [6]. Причем модифицирующая обработка приводит к относительно равномерному износу на всем протяжении резания до достижения критического износа.

Во время проведения испытаний на износ было установлено, что модифицирующая обработка твердых сплавов ВК8 и ТН-20 в большей степени эффективна при лезвийной обработке материалов с образованием элементной или суставчатой стружки. Формирование таких видов стружки снижает площадь контакта с передней поверхностью и тем самым уменьшающей износ по ней, что способствует менее интенсивному удалению модифицированного слоя.

Заключение

В ходе проведенных исследований было выявлено, что обработка тлеющим разрядом стали Р9 приводит к повышению ее твердости до 20% и износостойкости в 1,7 раза. После плазменной обработки в образцах из стали Р6М5 зафиксировано максимальное увеличение твердости до 12% и износостойкости до 3 раз. Обработка твердых сплавов ВК8 и ТН-20 в плазме тлеющего разряда приводит к увеличению их твердости до 15% и износостойкости до 3 раз.

Полученные в данной работе результаты могут быть использованы на промышленных предприятиях и в научных организациях, специализирующихся в области плазменной обработки и материаловедения, а также использованы в учебном процессе при разработке спецкурсов, рассчитанных на студентов физических и машиностроительных специальностей.

Список источников

1. Способ упрочнения изделий из металла или сплава, или сверхтвердого или графитсодержащего материала: Пат. № 22048 ВУ, С1 В. М. Шеменков, Ф. М. Трухачев, О.В. Обидина, М.А. Белая, А.Л. Шеменкова; заявитель и патентообладатель Гос. учреждение высш. проф. образования «Белорусско-Российский университет». – №20160207; заявл. 06.06.2016. опубл. 30.02.2018. – 3 с.

2. Григорович, В. К. Твердость и микротвердость металлов. – М.: Наука, 1976. – 230 с.
3. Металлообрабатывающий твердосплавный инструмент / В. С. Самойлов [и др.] – М.: Машиностроение, 1988. – 368 с.
4. Шеменков В. М., Белая М. А., Обидина О. В. И др. Влияние обработки тлеющим разрядом на структуру, фазовый состав, твердость и износостойкость быстрорежущей стали Р9 // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2017. – №4. – С. 535-541.
5. Обидина О.В., Шеменков В. М., Липский А. Э. и др. Влияние плазменной обработки на структуру и свойства быстрорежущих сталей Р6М5 и S90 // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2016. – №4. – С. 522-529.
6. Шеменков В.М., Обидина О.В., Белая М.А. и др. Повышение эксплуатационных характеристик режущего инструмента обработкой в плазме тлеющего разряда / Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2014. – №4. – С. 540-544.

**МЕТОДЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ
ИССЛЕДОВАНИЯ ОСОБЕННОСТЕЙ РАЗРУШЕНИЯ И
ВОССТАНОВЛЕНИЯ СТРУКТУРЫ И СВЕРХСТРУКТУРЫ ПРИ
ВЫСОКОИНТЕНСИВНЫХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ
ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ**

Старостенков М.Д., Чаплыгина А.А., Чаплыгин П.А.

Алтайский государственный технический университет им. И.И.

Ползунова, Барнаул, Россия

E-mail: genphys@mail.ru

Ключевые слова: метод Монте-Карло, метод молекулярной динамики, сплавы, NiAl, V-Ti-Cr, ОЦК-решетка

Особенности трансформации структуры материалов под действием высокоинтенсивных, высокоэнергетических частиц является важной фундаментальной проблемой, которая особенно проявилась при конструировании реакторов на тепловых нейтронах и, в частности, на быстрых нейтронах, а также при конструировании материалов космических технологий, когда они подвергаются воздействию «тяжелых» частиц, представляющих атомы, расположенные в конце периодической таблицы. Несмотря на большой объем проведенных исследований и полученных фундаментальных представлений о таких процессах, все еще остается неизвестным то многообразие ситуаций, имеющих место в материале, особенно на атомном, наноразмерном

уровне. Как правило, в качестве материалов реакторного материаловедения служат сложные многокомпонентные сплавы, регулярные твердые растворы на основе ОЦК решетки. В последнее время интерес к исследованию таких проблем обозначился в задачах конструирования стержней реакторов на быстрых нейтронах. Для погашения высокоинтенсивного воздействия на материал применяются многослойные сплавы, способные поглощать вносимую энергию, иметь тенденцию залечивания как внутри отдельного слоя, так и вблизи межслоевой границы. Особенностью научного исследования таких регулярных твердых растворов является то, что компоновка их на атомном уровне может быть многообразной, что должно приводить к многообразию процессов, реализуемых при высокоинтенсивном воздействии.

Параллельно с исследованием вышеперечисленных материалов проводится изучение интерметаллида NiAl эквиатомного состава. Данный материал вследствие высокой температуры сохранения порядка (до 1690 K) может служить объектом для применения при конструировании авиационных двигателей и материалов космических технологий. Отличительной особенностью интерметаллида NiAl является широкий интервал существования порядка по типу сверхструктуры B2 в пределах от 40% до 55% атомов алюминия [1]. При этом при отклонении от эквиатомного состава возникают и увеличиваются в числе домены, разделенные антифазными границами с выделениями избыточной компоненты. В какой-то мере данный материал ведет себя подобно регулярному твердому раствору, когда структура на атомном уровне может быть многообразна вследствие разнообразия доменов. По этой причине в проекте предлагается комплексное исследование регулярных твердых растворов V-Ti-Cr и сплав NiAl с отклонениями от эквиатомной стехиометрии.

Исследование проводится сочетанием двух методов компьютерного моделирования – методом Монте-Карло и методом молекулярной динамики.

Основным методом, позволяющим оценить спектр конфигураций, может служить метод Монте-Карло. В настоящем исследовании на первом этапе с использованием метода Монте-Карло выделяется набор конфигураций, соответствующий минимуму энергии. Моделирование состояния выполняется с учетом межатомных взаимодействий, определяемых в пяти координационных сферах в модели tight-binding потенциала, предложенного Мишиным с соавторами для сплава NiAl [2]. Для сплава V-Ti-Cr взаимодействия

реализуются в модели потенциала Саттона-Витека [3]. К границам расчетного блока кристалла прикладываются периодические граничные условия.

Метод Монте-Карло

Выполнение моделирования по методу Монте-Карло выполняется в соответствии с алгоритмом Метрополиса по вакансионному типу [4-6]. Температура кристалла постоянна во всем расчетном блоке: $T(x, y, z) = \text{const}$, в течение заданного времени эксперимента t . В структуру кристалла вводятся вакансии в соответствии с заданной концентрацией C_v , которая не изменяется в ходе каждого эксперимента с течением времени.

Используется вакансионный механизм диффузии. Динамическая или кинетическая составляющая присутствуют только в перескоках атомов в вакантные узлы. Состояние системы может изменяться только в дискретные моменты времени с шагом Δt . Связь текущего момента времени t_k с числом шагов k определялась по формуле: $t_k = k \Delta t$.

Продолжительность каждого эксперимента определяется в условных единицах времени, равных числу перескоков атомов на место вакантных узлов, т.е. $\Delta t = 1$ соответствует одной итерации. При каждой итерации рассчитывается вероятность перескока ближайшего к вакантному узлу атома i , находящегося от него на расстоянии одной-двух координационных сфер, на место этой вакансии по формуле:

$$p_i = A^{-1} \exp \left(\frac{E_{\max} - (E_i^i - E_k^i)}{kT} \right) \quad (1)$$

где E_i^i – энергия i -го атома в начальном положении; E_k^i – энергия i -го атома после перескока на место вакансии; A – константа нормировки; $E_{\max}$ – максимальная разность начальной и конечной энергий атомов. Номер соседнего атома i изменяется в соответствии с соотношением: $1 \leq i \leq M$, где M – число соседей на двух координационных сферах; $E_{\max}$ определяется по формуле:

$$E_{\max} = \max_{0 \leq i \leq M} (E_i^i - E_k^i).$$

Для определения константы нормировки A строится разбиение отрезка

$$0 - A \leq \Delta_1 < \Delta_1 < \Delta_1 < \Delta_1 < \dots < \Delta_{M-1} \quad A = 1$$

так, чтобы $|A_i - A_{i-1}| = p_i$. Затем при помощи генератора случайных чисел выбирается число $B \in [0; 1]$ и определяется отрезок разбиения, которому это число принадлежит, т.е. находится атом с индексом j из условия: $A_{j-1} \leq B < A_j$.

Согласно формуле (1), вероятность перескока атома в вакантный узел тем выше, чем больше должен быть выигрыш энергии. Далее атом с индексом j сорта s занимает место вакансии. Для фиксации такого перескока атома вакантный узел заполняется атомом сорта s , а атом с индексом j убирается из расчетного блока. После этого изменяется время счета на величину Δt . После выполнения всех итераций фиксируется конечная конфигурация расчетного блока, определяется фазовый состав сплава, рассчитываются значения энергий и параметры ближнего и дальнего порядков.

Метод молекулярной динамики

Как уже было отмечено, метод молекулярной динамики основывается на том, что поведение заданной совокупности атомов описывается в рамках классической механики, например, системой обыкновенных дифференциальных уравнений движения Ньютона [7-9].

В этом случае принимается, что взаимодействие атомов зависит лишь от расстояния между ними, и потенциальная энергия системы из N атомов равна

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i=1, i \neq j}^N \sum_{j=1}^N \phi_{ij}(r_{ij}), \quad (2)$$

где ϕ_{ij} – потенциальная функция взаимодействия пары отдельных атомов i и j , r_{ij} – расстояние между этими атомами.

Кинетическая энергия расчетной ячейки вычисляется по формуле

$$E = \frac{1}{2} \sum_i^N m_i v_i^2, \quad (3)$$

где m_i и $\vec{v}_i$ – масса и скорость i -го атома.

Сила, действующая на i -й атом в замкнутой системе, равна

$$\vec{F}_i = - \sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{d}{d(r_i - r_j)} \phi_{ij}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|), \quad (4)$$

где $\vec{r}_i, \vec{r}_j$ – радиус-векторы i -го и j -го атомов.

Если случай не релятивистский, то система уравнений движения

имеет вид: $\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i, \quad m_i \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \vec{F}_i$, где t – время.

Для любого из N атомов расчетного блока мерностью $\square$, позиции и скорости характеризуются $2\square N$ координатами: $x_i^k(t)$ описывает позиции в пространстве, $v_i^k(t) = \dot{x}_i^k(t)$ – скорости (k – индекс координатной оси).

Система уравнений (4) решается с помощью численных методов интегрирования дифференциальных уравнений. Используя метод Эйлера с полшагом получается следующая система уравнений в конечных разностях

$$v_i^k(t + \Delta t/2) = v_i^k(t - \Delta t/2) + \Delta t \cdot m^{-1} F_i^k(t).$$

$$x_i^k(t + \Delta t) = x_i^k(t - \Delta t/2) + \Delta t \cdot v_i^k(t + \Delta t/2), \quad (5)$$

где $\square t$ – шаг интегрирования.

Метод Эйлера для обыкновенных дифференциальных уравнений используется для решений многих задач естествознания в качестве математической модели.

Чтобы определить шаг интегрирования, используют эмпирическое правило, которое гласит: флуктуация полной энергии не может быть больше флуктуации потенциальной энергии. Для выполнения этого правила искусственно уменьшают энергетические флуктуации путем наложения на $\square t$ математических и физических ограничений. Математические ограничения связаны с погрешностями округлений при выполнении арифметических действий, а физические с тем, что шаг интегрирования не должен превышать $1/4$ наименьшего периода атомных колебаний. Дело в том, что при определенной температуре атомы и в жидком, и в кристаллическом состоянии совершают периодические колебания относительно положения, соответствующему минимуму потенциальной энергии. И в случае, если шаг интегрирования будет превышать $1/4$ наименьшего периода, колебания станут аperiодическими, что неизбежно приведет к росту энергии. Обычно, в методе молекулярной динамики шаг интегрирования принимают равным 10^{-13} – 10^{-15} с. В нашем случае для

двумерной модели он равен 10^{-15} с, в трехмерной модели шаг интегрирования принимался равным 10^{-14} с.

Температура расчетной ячейки задается через начальные скорости атомов в соответствии с распределением Максвелла:

$$T = \frac{2E}{3Nk}, \quad (6)$$

где k – постоянная Больцмана, N – мерность расчетной ячейки.

При этом начальные скорости задаются одинаковыми по абсолютной величине, но со случайными направлениями. Полная кинетическая энергия должна соответствовать заданной температуре, а суммарный импульс расчетной ячейки быть равным нулю:

$$\sum_{i=1}^N m_i \vec{v}_i = 0. \quad (7)$$

где $v_{ке}$ – среднеквадратичная скорость атома. Исходное распределение скоростей в процессе моделирования приближается к распределению Максвелла. При этом для этого требуется всего несколько итераций.

Оба метода, которые описаны выше являются базовыми при изучении свойств перспективных материалов. Именно благодаря сочетанию в исследовании достоинств каждого метода позволяет наиболее эффективно решать поставленные задачи. В данном исследовании отбор наиболее оптимальных конфигураций в сплаве NiAl вблизи эквиатомного состава в зависимости от концентрации компонент по относительно минимуму потенциальной энергии определяется по методу Монте-Карло. А методом молекулярной динамики выполняются расчеты траекторий движения заряженной частицы в интервале энергий от 5 до 20 кэВ и выявляются механизмы разрушения и перестройки структуры материала в процессе движения имплантируемой частицы.

Список литературы

1. Фазовые и структурные превращения в сплавах на основе моноалюминида никеля / С. В. Косицын, И. И. Косицына // Успехи физики металлов. - 2008. - Т. 9, No 2. - С. 195-258.
2. Purja Pun G.P., Mishin Y. Development of an interatomic potential for the Ni-Al system//Philosophical Magazin. -2009. -No.89
3. JieFu, XiaoqingLi, BörjeJohansson, JijunZhao Improved Finnis-Sinclair potential for vanadium-rich V–Ti–Cr ternary alloys / Journal of Alloys and Compounds, Vol. 705, 2017, pp 369-375

4. Potekaev A.I., Kulagina V.V., Klopotov A.A., Chaplygina A.A., Chaplygin P.A., Starostenkov M.D. Structural-phase low-stability states of bcc-intermetallic compounds with APB complexes / Russian Physics Journal. 2018. T. 60. № 10. С. 1776-1786.

5. Чаплыгин П.А., Старostenков М.Д., Чаплыгина А.А., Потекаев А.И. Особенности формирования антифазных доменов в сплаве NiAl при ступенчатом охлаждении / Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2015. Т. 12. № 1. С. 72-78.

6. Старostenков М.Д., Чаплыгина А.А., Попова Л.А., Потекаев А.И., Кулагина В.В. Упорядоченные фазы в сплавах системы CuPt / Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2011. Т. 8. № 4. С. 117-124.

7. Старostenков М.Д., Потекаев А.И., Маркидонов А.В., Кулагина В.В., Гринкевич Л.С. Динамика краевых дислокаций в слабоустойчивом состоянии ГЦК-системы при облучении высокоэнергетическими частицами / Известия высших учебных заведений. Физика. 2016. Т. 59. № 9. С. 105-112.

8. Poletaev G.M., Medvedeva E.S., Zorya I.V., Novoselova D.V., Starostenkov M.D. Molecular dynamics simulation of interaction of hydrogen impurity with twist boundaries in Pd and Ni / Materials Physics and Mechanics. 2016. T. 29. № 2. С. 133-137.

9. Захаров П.В., Маркидонов А.В., Старostenков М.Д., Полетаев Г.М., Ерёмин А.М., Обидина О.В. Влияние ударных послекаскадных волн на межфазную границу биметаллов Ni-Al, Ni-Fe / Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2016. Т. 13. № 1. С. 77-83.

ДИСКРЕТНЫЙ БРИЗЕР В МОДЕЛЬНОМ КРИСТАЛЛЕ Pt₃Cu СО СВЕРХСТРУКТУРОЙ L1₃

Старostenков М.Д.¹, Медведев Н.Н.², Захаров П.В.³

¹*Алтайский государственный технический университет им.
И.И. Ползунова, г. Барнаул*

²*Бийский технологический институт (филиал) Алтайского
государственного технического университета им. И.И. Ползунова», г.
Бийск*

³*Алтайский государственный гуманитарно-педагогический
университет имени В.М. Шукина, г. Бийск*

E-mail: nnm42@rambler.ru

Под дискретным бризером (ДБ) понимают пространственно локализованные колебательные моды большой амплитуды [1, 2]. ДБ

локализуют энергию от долей до нескольких электронвольт, могут быть как неподвижными, так и подвижными, их время существования лежит в диапазоне от десятков до тысяч периодов атомных колебаний, что может быть достаточным для модификации дефектной структуры кристалла [2]. Дискретные бризеры можно разделить на два типа по характеру зависимости частоты колебаний атомов от амплитуды. У ДБ с мягким типом нелинейности частота уменьшается с увеличением его амплитуды колебаний, такие дискретные бризеры могут существовать только в кристаллах, имеющих щель в фононном спектре: их частота лежит в щели фононного спектра и поэтому их называют щелевыми. У ДБ с жестким типом нелинейности частота растет с амплитудой, они могут иметь частоты как в щели, так и выше фононного спектра. ДБ с мягким типом нелинейности могут возбуждаться в биатомных кристаллах, а также в графене и графене. Бризеры с жестким типом нелинейности существуют в графене и в чистых металлах с ГЦК-, ОЦК-, ГПУ-структурами, в альфа-урани и алмазе [2–16]. Для чистых металлов или упорядоченных сплавов с небольшой разницей масс компонент, условия возбуждения ДБ с жестким типом нелинейности более специфичны, чем при возбуждении щелевых ДБ с мягким типом нелинейности.

Исследуя тот или иной кристалл на предмет возможности существования в нем дискретных бризеров, важным является тип его структуры и плотность фононных состояний. Сплавы, включающие в свой состав преимущественно платину, обладают рядом уникальных свойств, например, высокой температурой плавления, стойкостью к коррозии. Такие сплавы применяются в космической отрасли, стекольной и химической промышленности, видится перспективным применение их как основы для суперсплавов. Указанные сплавы имеют преимущественно ГЦК кристаллическую решетку, благодаря чему они обладают высокой прочностью и пластичностью.

В настоящей работе рассматривается модель кристалла Pt_3Cu со сверхструктурой $L1_3$, размером $80 \times 12 \times 12$ частиц, граничные условия для расчетного блока задавались периодическими, атомы взаимодействовали посредством парного потенциала Морзе:

$$\varphi_{PQ}(r_{ij}) = D_{PQ} \beta_{PQ} \exp(-\alpha_{PQ} r_{ij}) (\beta_{PQ} \exp(-\alpha_{PQ} r_{ij}) - 2) \quad (1)$$

где D – энергетический параметр, соответствующий глубине потенциальной ямы, α – параметр, определяющий жесткость межатомных связей, Параметры потенциала (1) для упорядоченного

сплава Pt_3Cu [17]: $D_{\text{CuCu}} = 0.3423$, $\beta_{\text{CuCu}} = 44.8726$,
 $\alpha_{\text{CuCu}} = 1.3342$, $D_{\text{PtPt}} = 0.7462$, $\beta_{\text{PtPt}} = 105.721$,
 $\alpha_{\text{PtPt}} = 1.61$, $D_{\text{PtCu}} = 0.598$, $\beta_{\text{PtCu}} = 45.302$,
 $\alpha_{\text{PtCu}} = 1.346$, вычислялись по стандартной методике из условий:

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^z \eta_i \varphi_{V=V_0} = E_s, \quad \frac{1}{2} \sum_{i=1}^z \eta_i \left(\frac{\partial \varphi}{\partial V} \right)_{V=V_0} = 0, \quad -V_0 \cdot \left(\frac{\partial P_s}{\partial V} \right) = K_0. \quad (2)$$

здесь E_s - энергия сублимации атомов кристалла при нуле Кельвин K_0 - объемный модуль упругости. Величина межатомного расстояния $a_0 = 3.775$. При этом учитывалось 7 координационных сфер. Массы атомов платины и меди: $m_{\text{Pt}} = 195.23$, $m_{\text{Al}} = 63.546$ а.е.м.

На рис. 1а) приведен вид кристалла CuPt_3 со сверхструктурой L1_3 , а на рис. 1б) показана плотность фоновных состояний рассматриваемой модели. По приведенным данным можно сделать вывод о том, что в таком кристалле не возможно существование дискретных бризеров с мягким типом нелинейности, в виду отсутствия щели в фоновном спектре. Таким образом, имеет смысл поиск ДБ с жестким типом нелинейности на атомах более легкой компоненты упорядоченного сплава, поскольку, очевидно, что частота их колебаний выше, чем у атомов платины.

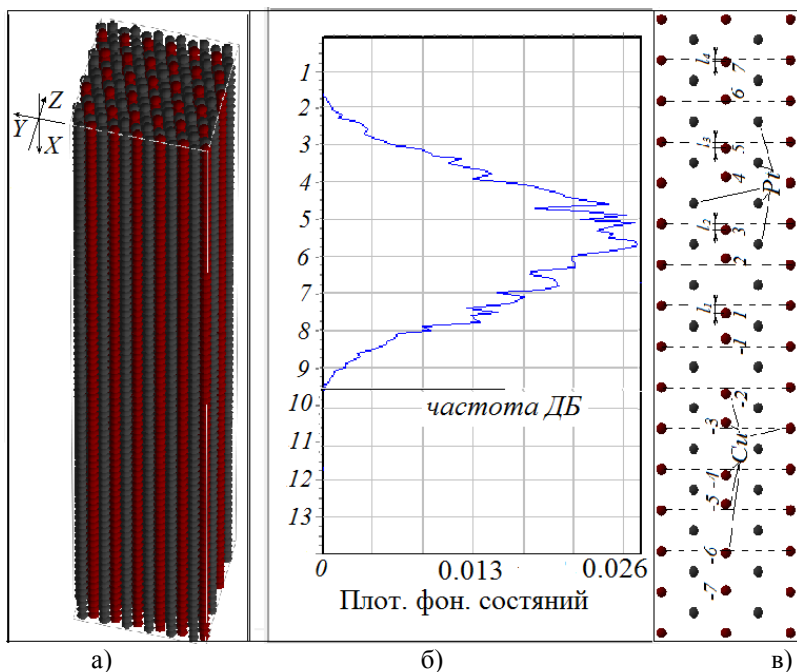


Рис. 1. а) трехмерная модель кристалла Pt₃Cu; б) плотность фононных состояний рассматриваемой модели; в) начальное положение атомов, несущих ДБ.

Поиски оптимальных начальных условий, необходимых для возбуждения бризера осуществлялись простым перебором различных вариантов. Анзац, позволяющий задавать начальные условия для возбуждения ДБ в двумерной модели кристалла [16] в нашей модели не позволял получить ДБ.

Возбуждение неподвижного ДБ с жестким типом нелинейности осуществлялось путем отклонения атомов вдоль плотноупакованного ряда Cu, так, как это показано на рис. 1 в). Смещения l_1 атомов под номерами 1 и -1 направлены навстречу друг другу и равны 0.5 Å, смещения атомов 2 и 3, -2 и -3, 4 и 5, -4 и -5, 6 и 7, -6 и -7 также направлены навстречу друг другу и равны $l_2 = l_3 = 0.4$ Å, $l_4 = 0.1$ Å соответственно (рис.1 в)). Указанные начальные условия позволяют получить бризер, атомы которого совершают колебания до полного затухания порядка 4,5 пикосекунды. На рис. 2 а) показаны колебания кинетической энергии атомов несущих колебательную моду ДБ в

течении первой пикосекунды, верхняя кривая, напоминающая синусоиду с биениями. Характер кривой указывает на большую степень немонохроматичности колебаний, и как следствие, относительно высокую скорость рассеяния энергии колебаний бризера. Нижняя жирная кривая на этом же рисунке отображает значение средней кинетической энергии атомов платиновой подрешетки. Ожидалось, что при затухании ДБ основная часть ее энергии должна была рассеяться по подрешетке Cu [18]. Однако стремительный подъем средней кинетической энергии атомов платиновой подрешетки упорядоченного сплава свидетельствовал о том, что энергия ДБ интенсивно рассеивалась в том числе и в платиновую подрешетку. Одним из факторов, стимулирующих такое интенсивное перетекание энергии от ДБ, локализованного на атомах Cu к атомам платиновой подрешетки, очевидно, является относительно небольшое соотношение масс атомов меди и платины.

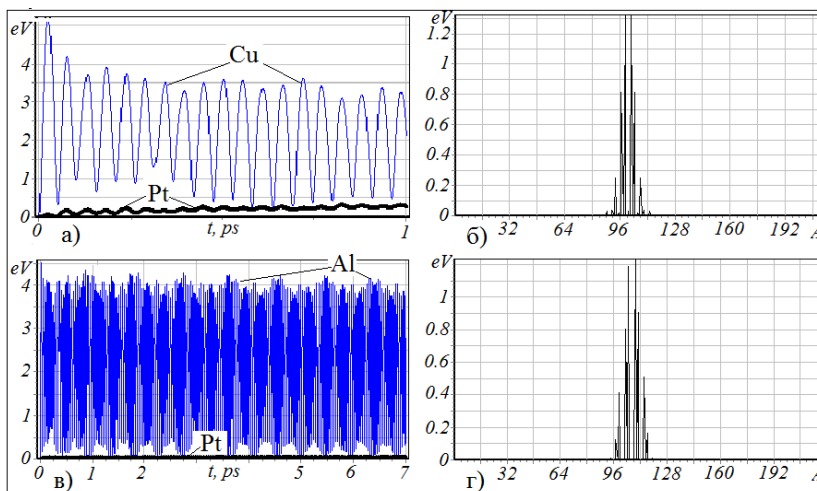


Рис. 2. а) зависимость от времени кинетической энергии атомов Cu, несущих ДБ в Pt₃Cu; б) пространственная локализация энергии ДБ в модельном кристалле Pt₃Cu; в) зависимость от времени кинетической энергии атомов Al, несущих ДБ в Pt₃Al; г) пространственная локализация энергии ДБ в модельном кристалле Pt₃Al.

На рис. 2 в) показана кривая колебаний кинетической энергии атомов, несущих нелинейные моды ДБ в модельном кристалле Pt₃Cu, в котором массу атомов Cu «уменьшили» до массы Al. На рисунке они

отмечены как колебания атомов Al. После уменьшения массы атомов Cu продолжительность колебаний ДБ значительно увеличилась, при этом кривая средней кинетической энергии атомов Pt на этом рисунке ни как себя не проявляет, т.е. ДБ на «легких» атомах передает энергию платиновой подрешетке очень медленно. Низкочастотные биения кривой кинетической энергии ДБ на рис. 2 в) свидетельствуют о том, что происходит перекачка энергии бризера в энергию фоновых колебаний кристаллической решетки.

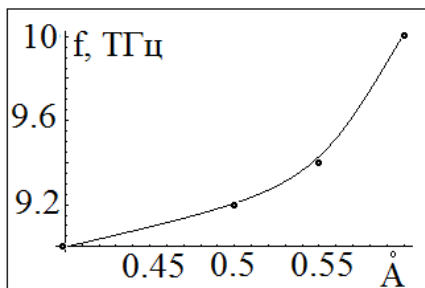


Рис. 3. Зависимость частоты ДБ от максимального начального отклонения атомов от положения равновесия.

На рисунках 2 б) и 2 в) показана степень пространственной локализации дискретных бризеров возбуждаемых в модельных кристаллах Pt_3Cu и Pt_3Al соответственно.

Отметим, что частота ДБ очень близка к верхней границе плотности фоновых состояний рассматриваемого кристалла (Рис. 1 б). Несмотря на то, что его колебания далеки от монохроматичных (рис. 2 а), зависимость его несущей частоты от максимального отклонения атомов (отклонения атомов 1 и -1 в начальный момент времени) типичная для ДБ с жестким типом нелинейности (Рис. 3)

Заключение

В кристалле $CuPt_3$ методом молекулярной динамики получен дискретный бризер с жестким типом нелинейности путем задания начальных смещений атомам меди. Рассмотрены условия возбуждения и основные характеристики этого бризера.

Список литературы

1. Sato M., Hubbard B.E., Sievers A.J., Ilic B., Czaplewski D.A., Craighead H.G. Observation of locked intrinsic localized vibrational modes in a micromechanical oscillator array // Physical Review Letters, 2003, vol. 90, no. 4, pp. 044102. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.90.044102>
2. Дмитриев С.В., Корзникова Е.А., Баимова Ю.А., Веларде М.Г.

Дискретные бризеры в кристаллах // Успехи физических наук. 2016. Т. 186, № 5. С. 471–488. [Dmitriev S.V., Korznikova E.A., Baimova Y.A., Velarde M.G. Discrete breathers in crystals // Physics-Uspekhi, 2016, vol. 59, no. 5, pp. 446–461. DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2016.02.037729>]

3. Захаров П.В., Старостенков М.Д., Ерёмин А.М., Корзникова Е.А., Дмитриев С.В. Возбуждение щелевых дискретных бризеров в кристалле состава A_3B потоком частиц // Физика твердого тела. 2017. Т. 59, № 2. С. 217–222. [Zakharov P.V., Starostenkov M.D., Eremin A.M., Korznikova E.A., Dmitriev S.V. Excitation of gap discrete breathers in an A_3B crystal with a flux of particles // Physics of the Solid State, 2017, vol. 59, no. 2, pp. 223–228. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1063783417020342>]

4. Zakharov P.V., Starostenkov M.D., Dmitriev S.V., Eremin A.M., Cherednichenko A.I. Discrete breathers in the crystal CuAu // Letters on Materials, 2016, vol. 6, no. 4, pp. 294–299. DOI: 10.22226/LM/2410-3535-2016-4-294-299

5. Murzaev R.T., Kistanov A.A., Dubinko V.I., Terentyev D.A., Dmitriev S.V. Moving discrete breathers in BCC metals V, Fe and W // Computational Materials Science, 2015, 98, pp. 88–92. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2014.10.061>

6. Старостенков М.Д., Захаров П.В., Ерёмин А.М. Изучение посредством двумерной модели возможности существования нелинейных локализованных колебаний на границе биметалла Pt-Al // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2011. Т. 8, № 4. С. 40–44.

7. Medvedev N.N., Starostenkov M.D., Zakharov P.V., Dmitriev S.V. Exciting discrete breathers of two types in a computer 3D model of Pt_3Al crystal // Technical Physics Letters, 2015, vol. 41, no. 10, pp. 994–997. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1063785015100259>

8. Terentyev D.A., Dubinko A.V., Dubinko V.I., Dmitriev S.V., Zhurkin E.E., Sorokin M.V. Interaction of discrete breathers with primary lattice defects in BCC Fe // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2015, 23:8, pp. 085007.13. DOI: <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0965-0393/23/8/085007>

9. Hizhnyakov V., Klopov M., Shelkan A. Transverse intrinsic localized modes in monatomic chain and in graphene // Physics Letters A, 2016, 380:9-10, pp. 1075–1081. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2016.01.011>

10. Кистанов А.А., Семенов А.С., Мурзаев Р.Т., Дмитриев С.В. Неподвижные и движущиеся дискретные бризеры в ГПУ металле Co //

Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. Т. 11, № 3. С. 322–326.

11. Мурзаев Р.Т., Корзникова Е.А., Бокий Д.И., Фомин С.Ю., Дмитриев С.В. Свойства неподвижных дискретных бризеров в альфа-уране // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2015. Т. 12, № 3. С. 324–330.

12. Murzaev R.T., Babicheva R.I., Zhou K., Korznikova E.A., Fomin S.Yu., Dubinko V.I., Dmitriev S.V. Discrete breathers in alpha-uranium // The European Physical Journal B, 2016, 89:7, pp. 168.

13. Chechin G. M., Dzhelauhova G. S., and Mehonoshina E. A. Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers // Physical Review E, 2006, vol. 74, pp. 36608. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.74.036608>

14. Zhou X. W., Johnson R. A., and Wadley H. N. G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapordeposited CoFe/NiFe multilayers // Physical Review B, 2004, vol. 69, pp. 144113. DOI: 10.1103/PhysRevB.69.144113

15. Захаров П.В., Дмитриев С.В., Старостенков М.Д., Ерёмин А.М., Корзникова Е.А. Стационарные квазibriзеры в моноатомных металлах с ГЦК-структурой // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2017. Т. 152, вып. 5 (11). С. 1073-1080. [Zakharov P.V., Dmitriev S.V., Starostenkov M.D., Eremin A.M., Korznikova E.A. Stationary quasi-breathers in monatomic FCC metals // Journal of Experimental and Theoretical Physics, 2017, vol. 125, no. 5, pp. 913–919. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1063776117100181>]

16. Кистанов А.А., Мурзаев Р.Т., Дмитриев С.В., Дубинко В.И., Хижняков В.В. Движущиеся дискретные бризеры в моноатомном двумерном кристалле // Письма в журнал экспериментальной и теоретической физики. 2014. Т. 99, № 6. С. 403–408. [Kistanov A.A., Murzaev R.T., Dmitriev S.V., Dubinko V.I., Khizhnyakov V.V. Moving discrete breathers in a monoatomic two-dimensional crystal // JETP Letters, 2014, vol. 99, no. 6, pp. 353–357. DOI: <https://doi.org/10.7868/S0370274X14060101>]

17. Starostenkov M.D., Bakaldin A.V., Pivenj V.V. Defects in alloys of L1₁, L1₀ superstructures and their influence on plastic deformation and phase transformations / Book of abstracts. Materials week' 93 TMS, USA, Pittsburgh, PA.- October 17-21, 1993.- p.163.

18. Medvedev N.N., Starostenkov M.D. and Manley M.E. Energy Localization on the sublattice of Pt₃Al with L1₂ order // Journal of Applied Physics. - 2013. - V.114. - P. 213506(4).

АКУСТИЧЕСКАЯ ЭМИССИЯ ПРИ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ СВИНЦОВОГО СПЛАВА Pb70Sn30*

Салита Д.С., Поляков В.В.

Алтайский государственный университет, г. Барнаул, Россия

E-mail: d.s.salita@gmail.com

При кристаллизации металлов из расплава возможно образование крупных кристаллов древовидной формы, формирующих во всей отливке или в ее значительной части дендритную структуру. Чаще всего дендриты образуются при кристаллизации сплавов за счёт неоднородности примесей [1, 2]. Наличие дендритов приводит к повышенной хрупкости металла. Для исследования механических свойств и деформационного поведения металлов и сплавов с дендритной структурой существенный интерес представляет изучение акустической эмиссии, возникающей при внешнем механическом воздействии на эти материалы. В качестве удобных модельных объектов для решения этой задачи выступают сплавы на основе свинца, поскольку низкая температура плавления и ряд других свойств обеспечивают формирование в диапазоне комнатных температур механизмов деформации, возникающих в других металлах и сплавах только при высоких температурах. Одновременно с этим исследование свинцовых сплавов представляет самостоятельный интерес, поскольку они достаточно широко используются в электронной промышленности и в качестве антифрикционных материалов в машиностроении, автомобильной и авиационной промышленности.

В настоящей работе для испытаний применялись свинцово-оловянные образцы, полученные путем рекристаллизации расплава 70%Pb – 30%Sn. Полученный расплав отливался в разогретую до 200°C форму и охлаждался со скоростью ~8°C/ч. После этого проводилась гомогенизация отливки при температуре 160°C в течении 48 часов. Образцы изготавливались в стандартном виде для испытаний на растяжение, размер плоской рабочей части составлял 53x10x5 мм. Как показали оптические микроструктурные исследования, это приводило к формированию дендритной структуры по всему объему образца. Параметры дендритной структуры количественно контролировались с помощью оптического микроскопии. Типичный вид микроструктуры полученных образцов приведена на рис. 1, где белые участки соответствуют дендритам свинца, темные – эвтектическому твердому раствору свинец-олово.



Рис.1. Микроструктура сплава Pb70Sn30.

Растяжение производилось на установке механических испытаний по «жесткой» схеме с постоянной скоростью деформирования. Условные напряжения σ и условные деформации ϵ рассчитывались по приложенной нагрузке и относительному удлинению образца. Результаты механических испытаний представлялись для анализа в виде кривых деформационного упрочнения в координатах $\sigma - \epsilon$.

Одновременно с измерениями механических параметров измерялись акустико-эмиссионные характеристики. Сигналы акустической эмиссии регистрировались с помощью широкополосного преобразователя акустической эмиссии с полосой пропускания от 50 до 500 кГц, частота дискретизации измерений составляла 2,5 МГц. В качестве параметров, характеризующих акустические сигналы, использовались среднеквадратичные значения напряжения акустической эмиссии U [3, 4]. На рис. 2 представлена типичная кривая деформационного упрочнения, а на рис. 3 - зависимость среднеквадратичного значения напряжения акустической эмиссии U от приложенной деформации ϵ .

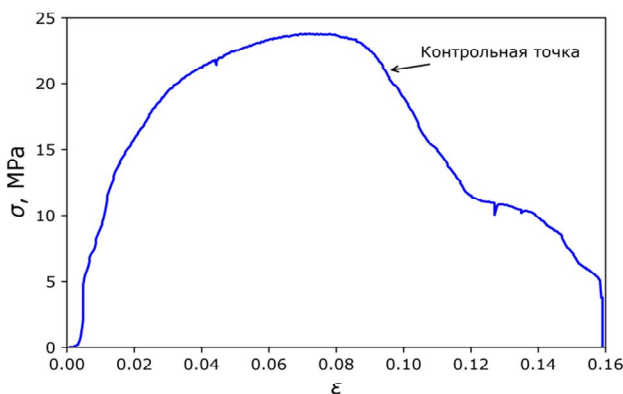


Рис.2. Деформационное упрочнение сплава Pb70Sn30.

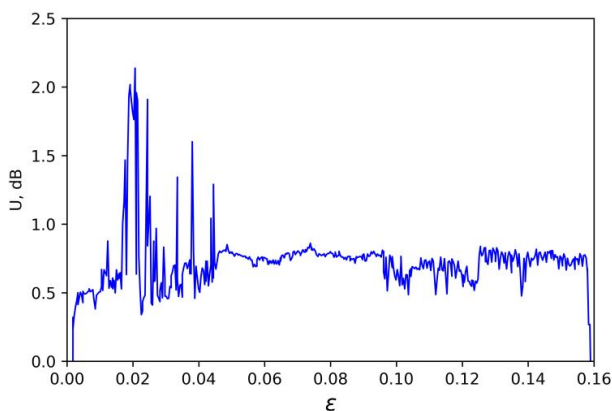


Рис.3. Акустическая эмиссия при нагружении сплава Pb70Sn30.

Анализ измеренных акустико-эмиссионных сигналов позволил выделить области пластической деформации, качественно различающиеся видом и мощностью сигналов. Акустико-эмиссионные кривые имеют осциллирующий вид, при этом амплитуда отдельных осцилляций при переходе к интенсивному пластическому течению падает. Очевидно, это различие обусловлено доминированием на той или иной стадии деформационного упрочнения разных механизмов пластической деформации.

Для исследования доминирующих механизмов и физических источников акустической эмиссии нагружение прерывалось в контрольных точках до полного разгрузки образца, после чего

проводился контроль микроструктуры с помощью оптической микроскопии. В качестве контрольных точек выбирались значения деформации, соответствовавшие различным стадиям деформационного упрочнения. Параметры структуры контролировались с помощью предварительно нанесенной путем процарапывания реперной сетки. Наличие разрывов и сдвигов на линиях сетки означало, что при деформировании происходил сдвиг структурных элементов относительно друг друга [5, 6].

Пример микроструктуры, полученной при $\square = 0,1$, приведен на рис. 4. Как видно из рис. 4, наблюдаются разрывы линий (участок 1) на границе структурных элементов, в качестве которых в данном случае выступали дендриты свинца. выступают дендриты свинца. Кроме того, выявлено образование пор (темные участки 2), расположенных между дендритами в области эвтектики. Такие поры служат дополнительными концентраторами упругих напряжений, релаксация которых сопровождается различными упругими эффектами [8,9]. По-видимому, при достаточно высокой деформации происходит движение дендритов друг относительно друга и последующее разрушение их отдельных участков, сопровождающееся акустическим излучением.

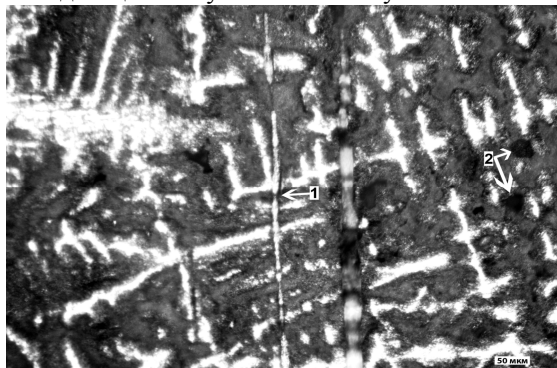


Рис. 4. Микроструктура деформированного сплава Pb70Sn30.

На рис. 5 приведена структура поверхности участка образца в области разрыва после его разрушения. Вид поверхности свидетельствует о достаточно сложном смешанном характере разрушения [10, 11].

Полученные результаты могут быть использованы при исследовании механизмов пластической деформации и разрушения свинцовых сплавов. Они также должны учитываться при интерпретации данных акустико-эмиссионного контроля

деформационного поведения материалов и изделий, изготовленных на основе свинца.

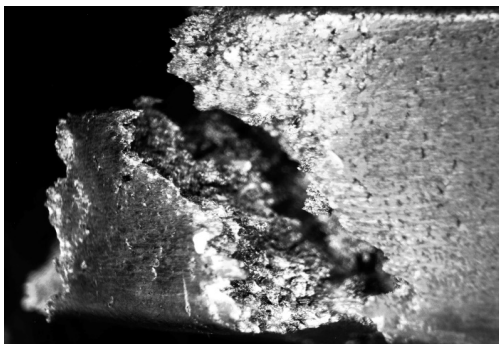


Рис.5. Поверхность образца сплава Pb70Sn30 в области разрушения.

**Статья подготовлена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №17-08-00914.*

Литература

1. Саратовкин Д.Д. Дендритная кристаллизация. М.: Металлургиздат, 1957. - 128 с.
2. Лахтин Ю.М. Металловедение и термическая обработка металлов. М., "Металлургия", 1983
3. Егоров А.В., Поляков В.В. Применение метода акустической эмиссии к исследованию деформационного поведения структурно-неоднородных материалов. Барнаул: Изд-во Алт. ун-та, 2008. 120 с.
4. Салита Д.С. Программно-аппаратный комплекс для регистрации акустической эмиссии при испытаниях материалов на растяжение. Часть 1. Измерительное устройство // Новые материалы и технологии. Сборник научных статей III Российско-Казахстанской молодежной научно-технической конференции. Барнаул: Изд-во Алт. ун-та, 2015.
5. Панин В.Е., Егорушкин В.Е., Елсукова Т.Ф. Физическая мезомеханика зернограницного скольжения в деформируемом поликристалл. // Физическая мезомеханика. 2011. - Т.14. С.15-22.
6. Елсукова Т.Ф., Новоселова Е.М., Караваева В.В., Ангелова Г.В. Стадии высокотемпературной ползучести поликристаллов свинца как эволюция структурных уровней

пластической деформации // Физическая мезомеханика. 2000. - Т.3. С.91-99.

7. Поляков В.В., Егоров А.В., Свистун И.Н. Исследование особенностей акустической эмиссии при пластической деформации и разрушении пористых металлов // Дефектоскопия. 2001. №9. С. 69-72.

8. Поляков В.В., Алексеев А.Н. Влияние пористости на внутреннее трение в металлах // Известия высших учебных заведений. Физика. 1994. Т. 37. № 6. С. 108-110

9. Поляков В.В., Головин А.В. Модули упругости пористых металлов // Физика металлов и металловедение. 1995. Т. 79. № 2. С. 57-60.

10. Кайбышев О.А., Валиев Р.З. Границы зерен и свойства металлов. Москва, Металлургия, 1987. – 368 с.

11. Ботвина Л.Р. Разрушение: кинетика, механизмы, общие закономерности. М.: Наука, 2008. 334 с.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ГЛАВНЫХ КОМПОНЕНТ К ВИХРЕТОКОВОМУ КОНТРОЛЮ ИЗДЕЛИЙ ИЗ МАГНИТНОЙ БРОНЗЫ*

А.В. Егоров¹, В.В. Поляков^{1,2}, Я.И. Борцова¹, S.V. Kucheryavskiy³

¹ *Алтайский государственный университет, г. Барнаул, Россия*

² *Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск, Россия*

³ *Aalborg University, Esbjerg, Denmark*

E-mail: egav@bk.ru

В диагностике изделий и конструкций из металлических материалов активно используются различные физические методы [1-8], что позволяет обеспечить контроль разных свойств и характеристик. Распространенным методом неразрушающего контроля является метод вихревых токов. Результат проводимых этим методом измерений зависит от о действием большого числа конкурирующих факторов, что снижает возможности диагностики. Ситуация существенно усложняется в случае магнитных металлических материалов, поскольку в этом случае к числу наиболее значимых физических характеристик добавляются величины, описывающие магнитные свойства материала. В настоящей работе для обработки результатов вихретоковых измерений, проводимых для магнитных материалов, привлекается математический аппарат многомерного

анализа данных, показавший свою высокую эффективность для случая немагнитных металлов и сплавов [9-10].

Испытания проводились для магнитной алюминиевой бронзы марки Бр9А4Ж и немагнитной оловянной бронзы марки Бр5О5Ц5С. Обе марки бронз широко применяются в современной технике в качестве антифрикционного материала. Бронза марки Бр9А4Ж, характеризовалась значением магнитной проницаемости $\mu = 1,1$, бронза марки Бр5О5Ц5С описывалась магнитной проницаемостью $\mu = 1$. Удельные электрические проводимости составляли для этих бронз $\sigma = 7,2$ МСм/м и $\sigma = 11,0$ МСм/м соответственно. Образцы для испытаний изготавливались из металлических прутков в виде плоскопараллельных пластин. Толщина образцов изменялась от $d = 1$ mm до $d = 20$ mm.

При проведении испытаний использовался автоматизированный измерительно-вычислительный комплекс, позволявший измерять импеданс параметрического датчика [11]. Измерения осуществлялись в частотном интервале от 100 Гц до 10 кГц. Получаемые результаты представлялись графически в виде годографов, при этом по оси абсцисс графиков откладывались

относительные изменения активного сопротивления датчика $\Delta R/X_0$, а по оси ординат – относительные изменения его реактивного

сопротивления $\Delta X/X_0$ (здесь $\Delta R = R - R_0$ - изменение активного сопротивления датчика при наличии образца, $\Delta X = \omega(L - L_0)$ - изменение реактивного сопротивления датчика при наличии образца, X_0 , L_0 , R_0 – соответственно активное сопротивление, индуктивность и реактивное сопротивление датчика без образца, ω - циклическая частота входного синусоидального сигнала).

Полученные данные в виде экспериментальных годографов приведены для исследованных бронз на рис. 1, каждая точка на этих рисунках соответствует одной фиксированной частоте. Из рис. 1 видно, что влияние магнитных свойств на годографы проявляется в том, что верхняя часть кривых годографов поднимается с ростом μ по оси реактивных сопротивлений. Такое поведение годографов обусловлено увеличением магнитного потока в системе при росте магнитной проницаемости. Влияние толщины образца проявлялось в том, что годографы для образцов разной толщины отличаются по форме. Это связано с ролью скин-слоя, причем при толщинах,

превышающих глубину скин-слоя, дальнейший рост величин d на поведении линий годографа уже не сказывался.

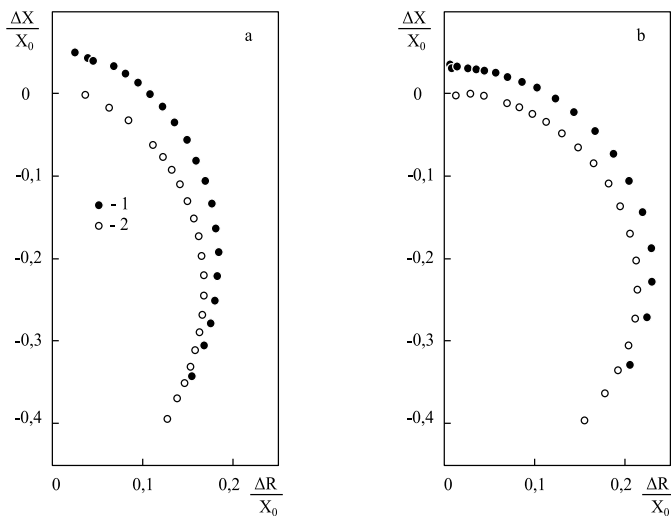


Рис. 1. Экспериментальные годографы для бронзы
а - толщина пластин 9 мм. б - толщина пластин 1,5 мм.
1 – бронза марки БрАЖ9-4, 2 – бронза марки БрОЦС5-5-5)

Для разделения влияющих на результаты измерений факторов был привлечен метод главных компонент [12-15]. Совокупность экспериментальных данных, описывавших годограф образца, рассматривалась как его вектор признаков. Для наглядного сопоставления результатов испытаний использовались проекции многомерных данных на плоскость двух первых главных компонент PC1 и PC2. Результаты расчетов представлены на рис. 2. Как видно из рис. 2, на плоскости PC1-PC2 сформировались линейно разделимые кластеры из точек, описывавших образцы с одинаковыми значениями магнитной проницаемости, удельной электропроводности и толщины образцов.

Таким образом, обработка результатов измерений с помощью метода главных компонент позволила наглядно разделить факторы, влияющие на вихретоковые испытания. Описанный метод может быть использован для повышения надежности и достоверности неразрушающего вихретокового контроля.

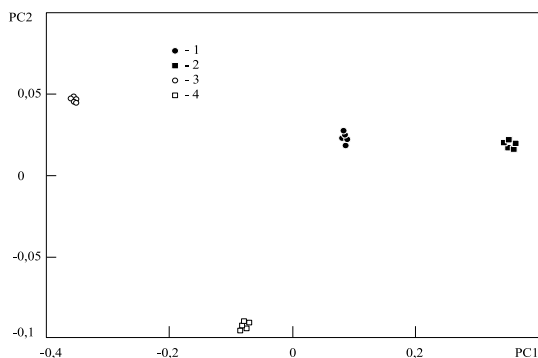


Рис. 2. Проекция экспериментальных данных, задававших годографы.

Бронза БрАЖ9-4: 1 – толщина пластин 9 мм; 2 – толщина пластин 1,5 мм

Бронза БрОЦС5-5-5: 3 – толщина пластин 9 мм; 4 – толщина пластин 1,5 мм

**Статья подготовлена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №17-08-00914.*

Литература

1. Mercier D, Lesage J, Decoopman X, Chicot D. Eddy currents and hardness testing for evaluation of steel decarburizing // NDT E Int 2006;39:652–60.
2. Song Z, Yamada T, Shitara H, Takemura Y. Detection of Damage and Crack in Railhead by Using Eddy Current Testing // J. Electromagn. Anal. Appl. 2011;3:546–50.
3. Pedersen LB, K.-A. M, Zhengsheng Y. Eddy Current Testing of Thin Layers Using Co-planar Coils // Nondestruct. Eval. 2000. Vol.12. Pp.53–64.
4. Mercier D, Lesage J, Decoopman X, Chicot D. Eddy currents and hardness testing for evaluation of steel decarburizing // NDT E Int. 2006. Vol. 39/ Pp. 652–660.
5. Егоров А.В., Поляков В.В. Вихретоковой контроль металлических материалов с помощью проекционных методов многомерного анализа данных // Дефектоскопия. 2018. №5. С.57-62.
6. Egorov A.V., Polyakov V.V., Salita D.S., Kolubaev E.A., Psakhe S.G., Chernyavsky A.G., Vorobei I.V. Inspection of aluminum

alloys by a multi-frequency eddy current method // Defence Technology. 2015. Т. 11. № 2. С. 99-103.

7. Поляков В.В., Головин А.В. Модули упругости пористых металлов // Физика металлов и металловедение. 1995. Т. 79. № 2. С. 57-60.

8. Поляков В.В., Сыров Г.В., Демьянов Б.Ф. Особенности пластической деформации пористых металлов // Металловедение и термическая обработка металлов. 1996. № 3. С. 21-23.

9. Егоров А.В., Поляков В.В. Применение метода главных компонент при вихретоковом контроле алюминиевых сплавов // Дефектоскопия. 2015. №10. С. 42-48.

10. Polyakov V.V., Egorov A.V., Pirogov A.A., and Kolubaev E.A. Application of Projection Methods of Multivariate Data Analysis in Eddy Current Testing of Materials. AIP Conference Proceedings. 2015. Vol. 1683. Pp. 0201851-0201854.

11. Егоров А.В., Поляков В.В., Иваков С.В. Измерительно-вычислительный комплекс для определения удельной электропроводности и магнитной проницаемости методом вихревых токов // Ползуновский вестник. 2010. № 2. С. 128-131

12. Esbensen K/H, Geladi P. Principal Component Analysis: Concept, Geometrical Interpretation, Mathematical Background, Algorithms, History, Practice. In: Brown E-CSD, Tauler R, and Beata Walczak, editors. Compr. Chemom., Oxford: Elsevier; 2009, p. 211–26.

13. Comon P. Independent component analysis, A new concept? // Signal Processing 1994;36:287–314.

14. Wold S, Sjöström M, Eriksson L. PLS-regression: a basic tool of chemometrics // Chemom. Intell. Lab. Vol. 2001. Pp. 09–30.

15. Лепендин А.А., Поляков В.В. Скейлинг характеристик акустической эмиссии при пластической деформации и разрушении // Журнал технической физики. 2014. Т. 84. № 7. С. 96-100.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ВЗАИМОСВЯЗАННЫХ КОЛЕБАНИЙ ПЬЕЗОТРАНСФОРМАТОРОВ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ И ТРИБОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК МАТЕРИАЛОВ И ПОКРЫТИЙ

¹Седалищев В. Н., ¹Сергеева Я.С., ²Родионов И. М.

¹*Алтайский государственный университет, Барнаул, Россия*

²*Восточно-казахстанский государственный университет им. С.
Аманжолова*

г. Усть-Каменогорск, Республика Казахстан

Исследование физико-механических характеристик поверхностей твердых тел, пленочных покрытий, в том числе микро - и нанопокровтий в настоящее время является важной и актуальной задачей [1, 2]. Для материалов с высоким значением упругого восстановления нельзя определить твердость корректно, используя традиционные методы измерения параметров отпечатка. Традиционные методы определения твердости не годятся для определения твердых и сверхтвердых покрытий, так как при малых нагрузках размер отпечатка настолько мал, что часто его невозможно наблюдать в оптический микроскоп, а большие нагрузки вызывают образование трещин. В связи с этим представляет интерес поиск новых методов определения не только физико-механических характеристик поверхностей твердых тел и покрытий, но и оценки их трибологических свойств.

В существующих трибометрах для создания механических перемещений чаще всего используют электродвигатели, с помощью которых обеспечивают поступательное или вращательное перемещение контактирующих поверхностей. В связи с этим трибодатчики такого типа позволяют измерять только коэффициент трения движения [2,3] в то время, как с помощью трибометров вибрационного типа изменяя амплитуду возвратно-поступательных перемещений контактирующих поверхностей можно исследовать упругие деформации микронеровностей, процессы трения трогания и т.п. Очевидно, что величина хода таких актюаторов должна соответствовать геометрическим размерам неровностей контактирующих поверхностей.

Одним из возможных подходов к решению данной проблемы может служить разработка устройства метода измерения фактической площади акустического контакта нагружаемых поверхностей с использованием связанных колебаний пьезотрансформаторов (ПТ) [4,5]. Суть предлагаемого метода заключается в использовании

высокочувствительных режимов взаимосвязанных колебаний составных пьезотрансформаторов для исследования физико-механических и трибологических характеристик материалов и покрытий. Для этой цели было разработано измерительное устройство с фиксированным усилием прижатия элемента связи к исследуемой поверхности (Рис. 1).

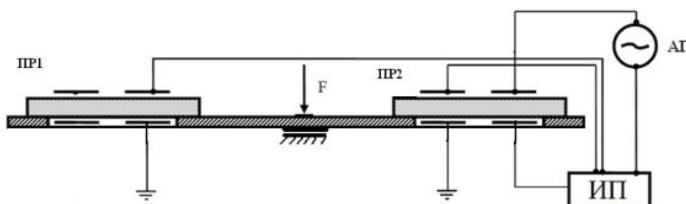


Рис. 1. Схема первичного измерительного преобразователя

Использование резонансных режимов работы устройства позволит повысить чувствительность трибометра вибрационного типа. Измеряя отношение выходных напряжений на обкладках пьезорезотрансформаторов, можно исследовать физико-механические и трибологические характеристики контактирующих поверхностей [4,5].

На рис.2 приведена фотография микрорельефа и профилограмма исследуемой поверхности.

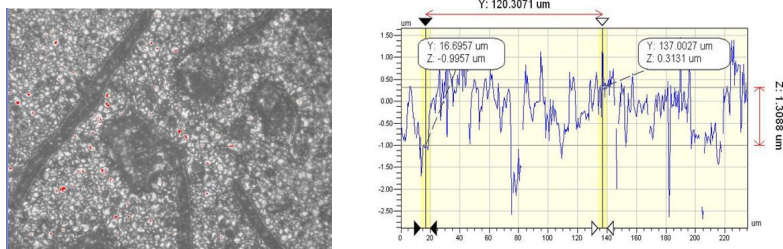


Рис.2. Фотография микрорельефа и профилограмма исследуемой поверхности в месте контакта с элементом связи преобразователя

Как видно из приведенных рисунков контактирующие поверхности характеризуются наличием микронеровностей, размер которых может достигать несколько микрометров. Размер и взаимное расположение таких неровностей, упругие пластические и деформации микровыступов под действием сдвливающих усилий определяют величину и характер акустической связи между взаимосвязанными пьезотрансформаторами. В зависимости от физических свойств исследуемого материала и элемента связи, режимов работы

колебательной системы ИП связь между резонаторами может быть, инерционной, упругой или диссипативной, последовательной и параллельной, продольной или поперечной, внешней или внутренней. Это предопределяет широкие возможности практического использования данного метода для решения самых разнообразных задач по исследованию характеристик материалов и покрытий.

Как известно из теории колебаний [6], при достаточно сильной связи между осцилляторами колебательная система с двумя степенями свободы может иметь два выраженных максимума амплитудно-частотной характеристики (АЧХ). На одной из нормальных частот синхронизации (НЧС) системы колебания осцилляторов происходят в фазе, а на другой – в противофазе. В первом случае элемент связи не участвует в колебаниях. Поэтому в области контакта элемента связи с исследуемой поверхностью не происходит смещения контактирующих плоскостей. В режиме противофазных колебаний пьезотрансформаторов элемент связи будет участвовать в процессе взаимообмена колебательной энергией между резонаторами. При этом в зависимости от усилия прижатия элемента связи к исследуемой поверхности будет изменяться характер и уровень связи в колебательной системе ИП. Измеряя амплитудные, фазовые и частотные характеристики взаимосвязанных колебаний пьезотрансформаторов можно производить оценку физико-механических и трибологических характеристик контактирующих поверхностей. Данный механизм чувствительности ИП может быть использовать для определения коэффициентов трения, для измерения упругих свойств материалов, покрытий, производить оценку степени шероховатости исследуемой поверхности.

При возбуждении колебаний на второй, более высокой НЧС, пьезорезонаторы совершают противофазные радиальные колебания. При этом контактирующие поверхности совершают противоположно направленные движения в радиальном и в поперечном направлении, и эквивалентная жесткость контакта будет определяться наличием как продольных, так и поперечных деформаций микронеровностей. При этом представляет особый интерес ситуация, когда в результате недостаточности усилия сдавливания ПР или при больших амплитудах противоположно направленных движений контактирующих поверхностей произойдет срыв упругих сдвиговых деформаций микронеровностей, в результате чего возникнет трение скольжения контактирующих поверхностей. Такое изменение механизма взаимодействия ПР вызовет соответствующее изменение выходных

параметров ИП. Наличие проскальзывания между контактирующими поверхностями обусловит уменьшение амплитуды колебаний приемного ПТ.

Таким образом, измеряя параметры связанных колебаний контактирующих ПР можно исследовать физико-механические характеристики контакта. С использованием данного метода определять твердость материала, шероховатость поверхности, модули упругости продольных и сдвиговых деформаций, коэффициенты трения качения, скольжения, покоя и т.п.

Список используемой литературы:

1. Булычев. С. И., Алехин В.П. Испытание материалов непрерывным вдавливанием. Машиностроение, М. 1990. 224 с.
2. Федосов С. А., Пешек Л.. Определение механических свойств материалов микроидентификацией. Современные зарубежные методики. МГУ. М. 2004. 100 с.
3. Гуткин М.Ю., Овидько И.А.. Физическая механика деформируемых наноструктур. Янус. СПб. 2003. Т. 1. 194 с.
4. Седалищев В. Н., Хомутов О. И. Высокочувствительные пьезорезонансные датчики с использованием связанных колебаний для экстремальных условий эксплуатации. – Барнаул: АлтГТУ, 2006. 184 с.
5. Седалищев В. Н. Измерительные устройства, основанные на реализации связанных колебаний в пьезорезонансных датчиковых структурах. // Ползуновский вестник. 2006. №2. – С. 264-270.
6. Андронов А.А. Теория колебаний/ А.А. Андронов, С.Э. Хайкин, А.А. Витт. – М.: Наука, 1981. 563 С

ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ МЕХАНИЗМА ТРИБОЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ В ПЬЕЗОТРАНСФОРМАТОРНЫХ ИЗМЕРИТЕЛЬНЫХ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯХ С ДВУМЯ СТЕПЕНЯМИ СВОБОДЫ

¹Седалищев В. Н., ¹Сергеева Я.С., ²Родионов И. М.

¹Алтайский государственный университет Барнаул, Россия

²Восточно-казахстанский государственный университет им. С.

Аманжолова

г. Усть-Каменогорск, Республика Казахстан

На рисунке 1 представлена структурная схема трибодатчика параметрического типа, представляющего собой колебательную систему, состоящую из двух контактирующих между собой составных пьезотрансформаторов [1]. Такая конструкция чувствительного

элемента датчика может быть использована для измерения различных физических величин: механических усилий; давлений; уровня жидких и газообразных сред; микроперемещений; температуры; влажности и т.п. В основе механизма чувствительности датчиков такого типа лежит управление процессами трения и упругих взаимодействий между контактирующими поверхностями твердых тел. Принцип работы измерительного устройства основан на использовании высокочувствительных процессов связанных колебаний в системах с двумя степенями свободы.

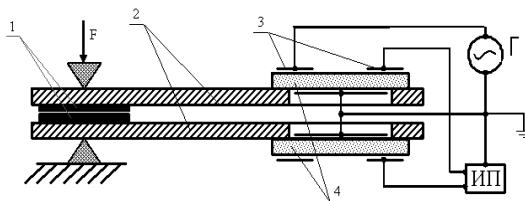


Рис. 1. Структурная схема трибодатчика с внутренней связью между составными пьезоэлектрическими трансформаторами

На частоте синфазных колебаний в такой системе с двумя степенями свободы связь между резонаторами слабая, по физической природе – упругая, внутренняя. Коэффициент связи при этом определяется упругими свойствами контактирующих поверхностей. На частоте противофазных колебаний ПЭТ связь более сильная, чем при синфазных колебаниях резонаторов. Это связано с появлением дополнительной составляющей механизма упругой связи, обусловленной наличием поперечных деформаций микронеровностей в результате противофазных движений резонаторов.

При увеличении усилия сдвливания контакта связь между резонаторами возрастает. Это происходит из-за увеличения фактической площади акустического контакта между пьезорезонаторами. В результате этого возрастает амплитуда колебаний ведомого ПЭТ, увеличивается отношение выходного напряжения ведомого ПЭТ к выходному напряжению ведущего ПЭТ.

На рисунке 2 приведены зависимости отношений выходных напряжений ПЭТ от величины напряжения возбуждения на первой (а) и второй (б) нормальных частотах синхронизации в системе (НЧС) при разных усилиях сдвливания контакта [1].

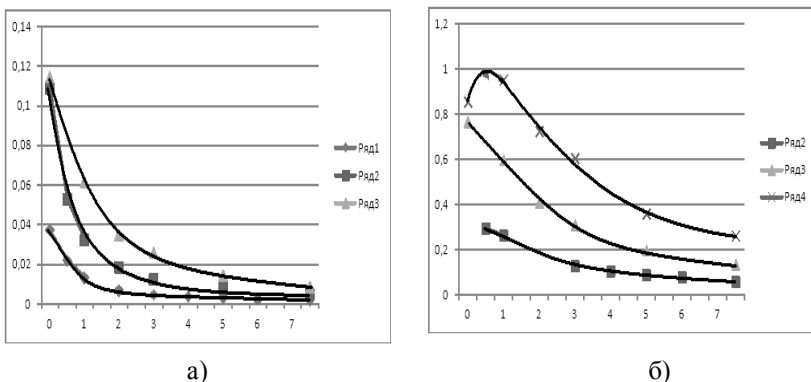


Рис.2. Зависимость отношения выходных напряжений ПЭТ от величины возбуждающего напряжения на первой (а) и второй (б) НЧС при разных усилиях сдвливания контакта

Как следует из приведенных графиков, при увеличении сдвливающих усилий максимум графика, отражающего зависимость отношения выходных напряжений ПЭТ от уровня напряжения возбуждения на 2НЧС, смещается вправо, в область больших амплитуд колебаний резонаторов. Это можно объяснить тем, что при увеличении амплитуд противофазных движений резонаторов появляется проскальзывание в месте их контакта. В результате возрастания потерь на трение уменьшается доля энергии, приходящая к ведомому ПЭТ со стороны возбуждаемого.

На основании полученных зависимостей можно сделать вывод о возможности использования отношения выходных напряжений на частое противофазных колебаний ПЭТ в качестве информативного параметра, для регистрации момента появления проскальзывания между контактирующими поверхностями. Зависимость такого критического режима взаимодействия резонаторов от величины напряжения возбуждения колебаний в системе при постоянном усилии сдвливания контактирующих поверхностей может быть использована, например, для определения коэффициента трения трогания материалов.

Важно отметить, что по физической сущности механизм трибочувствительности близок к понятиям акусточувствительности, тензочувствительности, которые реализуются, например, в пьезотрансформаторных ИП с амплитудным выходом [2] и в пьезорезонансных датчиках с частотным выходом [3]. В первом случае речь идет об управлении величиной активных потерь колебательной

системы датчика, а во втором случае об управлении упругостью резонатора. Но между этими понятиями есть и существенное различие, заключающееся в том, что чувствительным элементом датчика является область контакта твердых тел между собой в результате чего потери акустической энергии на излучение в окружающую среду не происходит. Например, если акусточувствительность ПТ ИП обусловлена рассеянием колебательной энергии в силопередающие элементы конструкции датчика, то чувствительность трибодатчика усилий обусловлена упругим взаимодействием резонаторов между собой или, в крайнем случае, потерями колебательной энергии на трение в области контакта. В связи с этим данный механизм чувствительности правильнее будет назвать трибочувствительностью, а датчики, основанные на модуляции связанных колебаний пьезорезонаторов ПТ трибодатчиками.

В настоящее время механизм трибочувствительности не нашел широкого применения в измерительной технике. Низкая стабильность физических процессов, протекающих при трении взаимно перемещающихся поверхностей, не позволяет создавать трибодатчики с высокими метрологическими характеристиками. Основной причиной этого является то, что при использовании в трибомерах вращательных или поступательных взаимных перемещений контактирующих поверхностей происходит разрушение микронеровностей. Это не позволяет обеспечивать необходимую точность измерения, воспроизводимость характеристик трибодатчиков. С целью повышения метрологических характеристик измерительных устройств такого типа требуется обеспечить стабильность во времени параметров контактирующих поверхностей. Это можно достигнуть за счет применения специальных износостойчивых материалов и покрытий в месте контакта.

Особенностью датчиков такого типа является то, что в них обеспечиваются очень малые скорости и амплитуды перемещений контактирующих поверхностей относительно друг друга. В связи с этим, при малой амплитуде колебаний пьезорезонаторов (в пределах нескольких нанометров) в месте контакта будут происходить преимущественно упругие деформации микронеровностей. Очевидно, что такой режим работы трибодатчика будет обеспечивать более высокую стабильность измерений и может быть использован для создания высокоточных трибодатчиков.

К достоинствам предложенной конструкции трибодатчика относится и то, что выходной сигнал формируется в результате

перераспределения колебательной энергии между взаимодействующими пьезорезонаторами. Это позволяет существенно уменьшить погрешности, обусловленные нестабильностью параметров используемых пьезоматериалов, повысить чувствительность за счет реализации связанных колебаний в системе, расширить функциональные возможности и область применения датчиков такого типа.

Например, в связи с тем, что реализуемый в трибодатчиках процесс трения трогания является критическим режимом и характеризуется высокой чувствительностью к воздействию различных факторов, то это может быть использовано для разработки высокочувствительных ПР трибодатчиков различных физических величин (температуры, давления, влажности, состава газа, жидкости и т.п.).

Метрологические характеристики пьезорезонансных трибодатчиков обусловлены особенностями их работы и определяют возможные области их практического применения. Регулируя амплитуду колебаний пьезорезонаторов, и, соответственно, амплитуду взаимных микроперемещений контактирующих поверхностей, устанавливая определенные значения усилий их прижатия, можно реализовать требуемые режимы работы ПР трибодатчиков.

Список используемой литературы

1. Седалищев В.Н. Пьезотрансформаторные из Высокочувствительные пьезорезонансные датчики с использованием связанных колебаний для экстремальных условий эксплуатации: монография. –Барнаул: Изд-во АлтГТУ, 2006 г. – 184 с.
2. Трофимов А.И. Пьезоэлектрические преобразователи статистических нагрузок: – М.: Энергоатомиздат, 1979 – 95 с.
3. Малов В.В. Пьезорезонансные датчики. – М: Энергоатомиздат, 1989. – 272 с.

Содержание

Московкина А.К., Богданов Д.Г., Богданов А.С. Структурное состояние термобарически спеченного детонационного алмаза	4
Богданов А.С., Богданов Д.Г., Московкина А.К., Макаров С.В., Шевчук Е.П. Теплопроводность термобарически спеченных алмазных материалов	9
Злобина Е.С. Акустическая эмиссии в условиях накопления и возврата деформации в никелиде титана	16
Trung N.T.H, Phuong H.S.M, Starostenkov M.D Effect of temperature on the threshold displacement energy in nickel	24
Захаров П. В., Ерёмин А. М., Старостенков М. Д., Чередниченко А. И., Кудряшова О. Б., Вдовин Р. С. Явление нелинейной супратрансмиссии в кристалле Pt ₃ Al при активном внешнем воздействии	30
Герцен В.С., Демьянов Б.Ф. Исследование поверхностного плавления меди	36
Рыжков П.Д., Демьянов Б.Ф. Плавление тонких пленок оксида меди	40
Зоря И.В., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д., Полетаев Я.Г. ² Молекулярно-динамическое исследование влияния упругой деформации на скорость миграции границ наклона в никеле	45
Ишутин И.А., Чепуров А.А. NaCl + CsCl: Эффективная среда для отжига кристаллов алмаза при высоком давлении	53
Карпович З.А., Жимулев Е.И. Оптимизация внутреннего объема ЯВД при росте алмаза в системе Fe-C-S	58
Белгибаева А.А., Еркасов Р.Ш., Курзина И.А., Косова Н.И., Абзаев Ю.А., Сачков В.И. Получение высокопрочных сплавов системы Ti-Al по «ГИДРИДНОЙ ТЕХНОЛОГИИ»	62
Т.А. Богданова, Г.А. Меркулова, Я.С. Чефанова, М.В. Вааг, А.Ю. Богданов Влияние температурных режимов нанесения лакокрасочных покрытий на эффект дисперсионного твердения без закалки литых изделий из эвтектического силумина	68
Фадеев Т.В., Гирн А.В., Лесков М.Б., Квеглиц Л.И.	70

Сталь Гадфильда – материал с термоэлектрическими свойствами	
<i>Оспанова Ж.Н., Жаксыбаева А.А., Чектыбаев Б.Ж., Садыков А.Д., Ерболатулы Д.</i> Расчетные оценки возможности омического пробоя газа аргон а токомаке КТМ	76
<i>Московкина А.К., Рыкова К.С., Злобина Е.С., Муравлев К.А., Елькина Е.А.</i> Исследование диффузионной зоны системы Ni-Al	81
<i>Рыкова К.С., Плотников В.А., Макаров С.В.</i> Структурные и кристаллографические особенности металлических пленок (Al, Cu, Zn)	86
<i>Сушкеева М.И., Насонов А.Д., Бетеньков Ф.М., Олейников А.Н.</i> Исследование механических свойств полимерных материалов на основе полибисмалеинимидной смолы	92
<i>Насонов А. Д., Бетеньков Ф. М., Новичихина Т.И., Зарецких А.А.</i> Влияние минерального наполнителя на механические свойства стеклопластиков	97
<i>Новоженов А.В., Стручева Н.Е., Белова О.В.</i> Анализ диаграмм состояния РЗМ с Зр-металлами	101
<i>Андрухова Т.В., Андрухова О.В.</i> Мониторинг электромагнитного смога в анизотропной среде	110
<i>Дмитриев А.А., Поляков В.В.</i> Применение параметра фрактальной размерности для анализа сигналов акустической эмиссии	118
<i>Зими́на Е.С., Демьянов Б.Ф.</i> Структура поверхностного рельефа меди.	124
<i>Ваттимури Д. Никифоров А.Г.</i> Магнитное поле стали X18H9T после электронно-лучевой обработки	131
<i>Семенов А.С., Корзникова Е.А., Дмитриев С.В., Evazzade I., Shahree S.G.</i> Двухфазное растяжение углеродной нанотрубки	135
<i>Семенова М.Н., Абдуллина Д.У., Семенов А.С., Корзникова Е.А., Дмитриев С.В.</i> Устойчивость делокализованной нелинейной моды в решетке графена в присутствии нормальных возмущений	141
<i>Ахметжанов Б.К., Макашина К.А., Шевчук Е.П., Плотников В.А.</i> Получение спектров методом рентгено-флуоресцентного анализа и механизмы разрушения сплава 36НХТЮ при одноосном растяжении	148

Сапрыкин Д. Н., Попов А.С., Эссаулов В.В., Проскурин И.П., Феодоренко Д.Е., Насибуллин Р.В. Моделирование структурных превращений при спекании бериллиевой керамики	153
Минакова Н.Н., Едакин Н.В., Иванова В.В. Особенности использования фильтра Габора в технологии идентификации по отпечаткам пальцев	159
Минакова Н.Н., Силютин А. Оценка характеристик многокомпонентных полимерных материалов по границам раздела сред на микрофотографиях структуры	165
Тружников В.Ю., Трекова Я.А., Кантай Н., Юшков Н.Ю., Лещенко Д.В., Ештокина А.И., Станкеев В.В., Селин И.Н. Структурные и магнитные превращения в бериллиевой керамике с различным содержанием нанопорошка TiO_2	171
Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Кустов С.Л. Атомные механизмы укрупнения зерен ГЦК-кристалла в условиях высокоэнергетического внешнего воздействия	178
Маулет М., Маулет А., Квеглис Л.Е., Иманжанова К.Т., Абылкалыкова Р.Б. Компьютерное моделирование и постановка лабораторной работы по графическому представлению спектров возбуждения атома водорода	185
Соломатин К.В., Елькина Е.А. Определение толщины тонкой углеродной пленки оптическими методами	188
Клопотов А.А., Потеекаев А.И., Марченко Е.С., Байгонакова Г.А. Термоупругие мартенситные превращения в сплавах на основе никелида титана, легированного кобальтом	197
Устинов А.М., Курган К.А. ¹ , Клопотов А.А., Потеекаев А.И., Абзаев Ю. А., Зеленков А. А. Изучение макроскопического течения в области сварного шва титанового сплава ВТ1-0 на поверхности образцов при деформации растяжением методом корреляции цифровых изображений	204
Рабыко М.А., Елисеева А.Н., Верещак С.В., Пищик В.И., Обидина О.В. Обработка тлеющим разрядом как перспективный метод улучшения эксплуатационных свойств инструментальных	212

материалов	
<i>Старостенков М.Д., Чаплыгина А.А., Чаплыгин П.А.</i> Методы компьютерного моделирования для исследования особенностей разрушения и восстановления структуры и сверхструктуры при высокоинтенсивных воздействиях высокоэнергетических частиц	217
<i>Старостенков М.Д., Медведев Н.Н., Захаров П.В.</i> Дискретный бризер в модельном кристалле Pt_3Cu со сверхструктурой $L1_3$	223
<i>Салита Д.С., Поляков В.В.</i> Акустическая эмиссия при пластической деформации свинцового сплава $Pb70Sn30$	231
Егоров А.В., Поляков В.В., Борцова Я.И., Kucheryavskiy S.V. Применение метода главных компонент к вихретоковому контролю изделий из магнитной бронзы	236
<i>Седалищев В. Н., Сергеева Я.С., Родионов И. М.</i> Использование взаимосвязанных колебаний пьезотрансформаторов для исследования физико-механических и трибологических характеристик материалов и покрытий	241
<i>Седалищев В. Н., Сергеева Я.С., Родионов И. М.</i> Особенности реализации механизма трибочувствительности в пьезотрансформаторных измерительных преобразователях с двумя степенями свободы	244

Научное издание

НОВЫЕ МАТЕРИАЛЫ И ТЕХНОЛОГИИ

ВЫПУСК VI

Сборник научных статей
VI Российско-Казахстанской молодежной научно-технической
конференции

Статьи публикуются в авторской редакции

Подписано в печать 2018 г.
Объем уч.-изд. л. Формат 60x84/16. Бумага офсетная.
Тираж 100 экз. Заказ № ____