

18-Материаловедение и физические методы исследования материалов, прикладная физика

Авачёв Алексей Петрович, аспирант 2 года

Рязанская Государственная Радиотехническая Академия, электроники

Моделирование тонкопленочного полевого транзистора на неупорядоченных полупроводниках

Научный руководитель: Вишняков Николай Владимирович, к.т.н.

E-mail: avachev_a@fromru.com стр. 544

Адилов Зарахман Ашуралиевич, аспирант

Санкт-Петербургский Государственный Морской Технический Университет, фак-т естественно-науч. и гуманитарного образовани

Особенности применения рельсового ускорителя масс (рельсотрона) в морских условиях.

Научный руководитель: Легуша Фёдор Фёдорович, д.ф.м.н.

E-mail: Adilov79@mail.ru стр. 545

Асеев Данил Леонидович, 5 курс

Уральский Государственный Университет, математико-механический

Влияние слабой конвекции на кристаллизацию расплава

Научный руководитель: Александров Д.В., д.ф.м.н.

E-mail: dmitri.alexandrov@usu.ru стр. 546

Асеев Данил Леонидович, 5 курс

Уральский Государственный Университет, математико-механический

Автомодельная кристаллизация с двухфазной зоной

Научный руководитель: Александров Д.В., д.ф.м.н.

E-mail: Dmitri.Alexandrov@usu.ru стр. 547

Борисова Мария Захаровна, аспирант

Институт Физико-Технических Проблем Севера СО РАН, отдел технологических процессов и материаловедения

Структура и свойства стали Ст3 подвергнутой равноканальному угловому прессованию

Научный руководитель: Яковлева Софья Петровна, к. т. н.

E-mail: bormaria@yandex.ru стр. 548

Бураева Елена Анатольевна, научный сотрудник

Центр Радиационной экологии и технологий, НИИ Физики РГУ

О механизме наработки радионуклидов методом активации двухфазных мишеней на электронных ускорителях.

Научный руководитель: Давыдов Михаил Гаврилович, д.ф.м.н.

E-mail: nucllab.davidov@mail.ru стр. 549

Великохацкий Дмитрий Александрович, 4 курс

Ростовский Государственный Университет, физический

Локальная и электронная структура кластеров железа интееколлированных в углеродные нанотрубки

Научный руководитель: Яловега Галина Эдуардовна, к.ф.м.н.

E-mail: yalovega@ctsnet.ru стр. 550

Волегов Алексей Анатольевич, аспирант 3 года

Челябинский Государственный Педагогический Университет, физический

Использование химических сдвигов C1s-линии для расчета концентрации фтора в частично карбонизованном ПВДФ

Научный руководитель: Песин Леонид Абрамович, д.ф.м.н.

E-mail: voligov@cspu.ru стр. 550

Гарбузова Анна Михайловна, 3 курс

Ростовский Государственный Университет, физический

Синтез и структура марганецсодержащих перовскитов

Научный руководитель: Рудская Анжела Григорьевна, к.ф.м.н.

E-mail: rudskaya@phys.rsu.ru стр. 552

Герасимова Наталья Витальевна, 5 курс
Ижевский Государственный Технический Университет, приборостроительный
Температуропроводность систем FeSn в окрестности температуры Кюри
E-mail: slokam@mail.ru стр. 552

Грачева Ирина Евгеньевна, 5 курс
Санкт-Петербургский Государственный Электротехнический Университет, электроники
Нанокристаллические композиты на основе оксидов олова, кремния и индия как основа для газочувствительных сенсоров
Научный руководитель: Луцкая Ольга Федоровна, к.ф.-м.н.
E-mail: VAMoshnikov@mail.eltech.ru стр. 553

Далиев Шахрух Хожакбарович, 3 курс
Национальный Университет Узбекистана, физический
Дефектообразование в кремнии, легированном гафнием
Научный руководитель: Власов Сергей Игоревич, д.ф.-м.н.
E-mail: shahrik1985@yandex.ru стр. 554

Дементьева Марина Геннадьевна, 4 курс
Томский Государственный Университет, физический
Кристаллогеометрическая модель фазового перехода B2-R сплавов на основе TiNi
E-mail: artifakt83@mail.ru стр. 555

Демидов Николай Александрович, аспирант
Институт Физико-Технических Проблем Севера СО РАН, лаборатория высокоэнергетических технологий
Исследования структурын аплавленного порошкового материала с модифицирующими добавками
Научный руководитель: Яковлева Софья Петровна, к.т.н.
E-mail: tsm1982@mail.ru стр. 556

Ермолаев Григорий Викторович, 6 курс
Новосибирский Государственный Университет, физический
Математическое моделирование образования шероховатости, при кислородной газо-лазерной резке малоуглеродистой стали
Научный руководитель: Ковалев Олег Борисович, д.ф.-м.н.
E-mail: gve@ngs.ru стр. 557

Жиряков Алексей Васильевич, 5 курс
Брянский Государственный Университет, физико-математический
Исследование теплопроводности монокристаллического кремния в интервале температур 50-300 К
Научный руководитель: Попов Павел Аркадьевич, к.ф.-м.н.
E-mail: tfbgubry@rol.ru стр. 559

Жуков Евгений Александрович, 6 курс
Челябинский Государственный Университет, физический
Применение метода гармонического анализа для изучения тонкой структуры графитированных материалов.
Научный руководитель: Тюменцев Василий Александрович, д.ф.-м.н.
E-mail: john_mad@mail.ru стр. 560

Ишков Алексей Владимирович, докторант
Алтайский Государственный Университет, физико-технический
Программный комплекс и установки для исследования структурно-неоднородных сред и краевых явлений
E-mail: olg168@rambler.ru стр. 561

Ишков Алексей Владимирович, докторант
Алтайский Государственный Университет, физико-технический
Структурирование проводящих наполнителей в полимерных композитах за границей протекания
E-mail: olg168@rambler.ru стр. 562

Кирикович Марина Антоновна, аспирант
Ростовский Государственный Университет, физический

Применение симплекс-планирования для случая рентгенофлуоресцентного анализа материалов широко изменяющегося состава

Научный руководитель: Дуймакаев Шамиль Исакович, Цветянский Александр Леонидович, к.ф.-м.н.
E-mail: yulia03@phys.rsu.ru стр. 564

Козлов Сергей Александрович, аспирант

Владимирский Государственный Университет, радиофизики, электроники, медицинской техники

Магнито-импульсная метательная установка для проведения ударных испытаний материалов и изделий

Научный руководитель: Татмышевский Константин Вадимович, к.т.н.

E-mail: piit@mail.ru стр. 565

Кондратьев Евгений Александрович, 3 курс

Томский Государственный Университет Систем Управления и Радиоэлектроники, радиотехнический

Опτικο-телевизионный метод исследования состояния деформированного твердого тела

Научный руководитель: Зариковская Наталья Вячеславовна, к.ф.-м.н.

E-mail: lama@ms.tusur.ru стр. 565

Криворучко Андрей Владимирович, 4 курс

Ростовский Государственный Университет, физический

Эффективные коэффициенты электромеханической связи 0-3-композитов сегнетопьезокерамика-полимер

Научный руководитель: Тополов Виталий Юрьевич, д.ф.-м.н.

E-mail: kolandr@rostov.ru стр. 566

Крупский Дмитрий Сергеевич, магистрант 1 года

Новосибирский Государственный Университет, физический

Термодинамические характеристики метанового гидрата кубической структуры I. Эффект самоконсервации.

Научный руководитель: Белослудов Владимир Романович, д.ф.-м.н.

E-mail: kid_nsu@ngs.ru стр. 567

Курган Валентина Николаевна, 5 курс

Челябинский Государственный Университет, физический

Особенности применения методов анализа форм профилей рентгеновских дифракционных максимумов для исследования углеродных материалов

Научный руководитель: Беленков Евгений Анатольевич, д.ф.-м.н.

E-mail: belenkov@csu.ru стр. 568

Лукашевский Михаил Владимирович, аспирант 1 года

Московский Энергетический Институт (МЭИ), институт теплоэнергетики и технической физики

Развитие методики послойного анализа поверхности на основе спектроскопии отраженных электронов

Научный руководитель: Афанасьев Виктор Петрович, д.ф.-м.н.

E-mail: lukashevsky-m@yandex.ru стр. 569

Макаров Сергей Викторович, аспирант

Алтайский Государственный Университет, физико-технический

Макроскопические деформационные скачки и акустическая эмиссия в ходе ползучести меди

Научный руководитель: Плотников Владимир Александрович, д.ф.-м.н.

E-mail: plotnikov@phys.dcn-asu.ru стр. 570

Малашенко Артем Викторович, 4 курс

Брянский Государственный Университет, физико-математический

Теплопроводность кристаллов гадолиний-галлиевого граната, легированного ионами иттербия, в интервале температур 50-300 К

Научный руководитель: Попов Павел Аркадьевич, к.ф.-м.н.

E-mail: ffbubry@rol.ru стр. 571

Митрохин Алексей Александрович, ассистент

Уральский Государственный Технический Университет (УПИ), физико-технический

Фотостимулированная электронная эмиссия и точечные дефекты в наноструктурных диоксидах кремния и германия

Научный руководитель: Зацепин А.Ф., к.т.н.

E-mail: mitrohin@dpt.ustu.ru стр. 572

Морозова Татьяна Владимировна, аспирант 3 года
Кемеровский Государственный Университет, физический
Исследование топографии центров чувствительности и центров впадины на поверхности микрокристаллов AgBr

Научный руководитель: Колесников Лев Васильевич, д.ф.-м.н.
E-mail: natasha-g@list.ru стр. 573

Нестеров Владимир Николаевич, аспирант
Томский Политехнический Университет, физико-технический
Эквивалентная температура облучения графита ячеек СУЗ реактора с графитовым замедлителем

Научный руководитель: Шаманин Игорь Владимирович, д.ф.-м.н.
E-mail: nesterov@phtd.tpu.ru стр. 574

Ольховая Юлия Андреевна, 3 курс
Ростовский Государственный Университет, физический
Исследование локального окружения активных центров никелиевых и медных комплексов

Научный руководитель: Яловега Г.Э., к.ф.-м.н.
E-mail: yalovega@ctsnet.ru стр. 575

Орлов Сергей Александрович, 4 курс
Томский Государственный Университет, физико-технический
Масштабные факторы физико-химических процессов в реагирующей порошковой среде

Научный руководитель: Дмитриева Мария Александровна, к.ф.-м.н.
E-mail: orlov@ff.tsu.ru стр. 576

Петерсон Михаил Владимирович, аспирант
Хабаровский Государственный Технический Университет, институт информационных технологий
Процессы самоорганизации при лазерном воздействии на композиционные материалы

Научный руководитель: Кузьменко Александр Павлович, д.ф.-м.н.
E-mail: kap@mail.khstu.ru стр. 578

Погорелый Дмитрий Константинович, инженер
РНИЦ `Курчатовский институт`, КЦСИ и НТ
Развитие методов исследования материалов и биологических объектов на станции `МЕДИАНА` Курчатовского источника синхротронного излучения

Научный руководитель: Подурец Константин Михайлович, д.ф.-м.н.
E-mail: pogodi@kcsr.kiae.ru стр. 579

Поздеева Мария Александровна, 5 курс
Удмуртский Государственный Университет, физический
Исследования возможного формирования структуры металлофуллерита в системах Fe-C, Fe-C60/70

Научный руководитель: Никонова Роза Музафаровна, к.т.н.
E-mail: MarusiaP@yandex.ru стр. 580

Потанахина Любовь Николаевна, аспирант 2 года
Ульяновский Государственный Университет, физико-технический
Особенности C-V-характеристик в структурах на основе твердого раствора InGaN

Научный руководитель: Грушко Наталья Сергеевна, д.ф.-м.н.
E-mail: kapiton04@yandex.ru стр. 580

Потанахина Любовь Николаевна, аспирант 2 года
Ульяновский Государственный Университет, физико-технический
Подвижность и время жизни в структурах на основе твердого раствора InGaN

Научный руководитель: Грушко Н. С., д.ф.-м.н.
E-mail: kapiton04@yandex.ru стр. 582

Потапова Светлана Викторовна, 5 курс
Казанский Государственный Университет, физический
Исследование нефтяных дисперсных систем методом диэлектрической спектроскопии

Научный руководитель: Гусев Юрий Александрович, к.ф.-м.н.
E-mail: svet_lana1@mail.ru стр. 583

Румянцев Василий Александрович, 3 курс
Хабаровский Государственный Технический Университет, институт информационных технологий
Формирование углеродных частиц на поверхности меди электродуговым осаждением в вакууме
Научный руководитель: Пячин Сергей Анатольевич, к.ф.-м.н.
E-mail: ammigos@mail.ru стр. 584

Рыбин Владислав Витальевич, аспирант 2 года
Ульяновский Государственный Университет, физико-технический
Образование петлевых дислокаций в кремнии вблизи локальных тепловых источников
Научный руководитель: Скворцов Аркадий Алексеевич, к.ф.-м.н.
E-mail: vlad_rib@mail.ru стр. 585

Самсонова Алина Васильевна, вед. инженер
Институт Физико-Технических Проблем Севера СО РАН, лаборатория высокоэнергетических технологий
Исследования процесса жидкофазного спекания порошковых систем Al-Cr
Научный руководитель: Винокуров Геннадий Георгиевич, к.т.н.
E-mail: tsm1982@mail.ru стр. 586

Сафонов Александр Николаевич, аспирант
Казанский Государственный Энергетический Университет, электронной техники и автоматизации
Кристаллохимические особенности системы соединений Cu-S
Научный руководитель: Матухин Вадим Леонидович, д.ф.-м.н.
E-mail: alx_rus@mail.ru стр. 587

Свеженцова Екатерина Витальевна, м.н.с.
Институт Физики Полупроводников СО РАН,
Изучение влияния высокотемпературного отжига на элементный состав нанокристаллического кремния
E-mail: katt@univ.kiev.ua стр. 587

Сивцова Полина Александровна, аспирант 2 года
Белорусский Государственный Университет, физический
Исследование стабильности механических свойств быстрозатвердевшей фольги сплава Al4, легированного Ni и Cr.
Научный руководитель: Шепеливич Василий Григорьевич, д.ф.-м.н.
E-mail: mikhalch@mail.ru стр. 588

Скурыдина Елена Михайловна, аспирант 2 года
Алтайский Государственный Технический Университет, информационных технологий и бизнеса
Физико-механические свойства композитов из сосны, полученных без связующих веществ
Научный руководитель: Маркин Виктор Борисович, д.т.н.
E-mail: skur@alt.ru стр. 589

Соколова Мария Николаевна, 3 курс
Челябинский Государственный Педагогический Университет, физический
Влияние одноостной деформации на ИК-спектры карбиноидов
Научный руководитель: Песин Леонид Абрамович, д.ф.-м.н.
E-mail: Sokolovamn@rambler.ru стр. 590

Спирин Николай Сергеевич, 3 курс
Ярославский Государственный Университет, физический
О возможности ЭП контроля сная поршневой вставки ДВС
Научный руководитель: Митрофанов Виктор Анатольевич, к.ф.-м.н.
E-mail: kolyns@rambler.ru стр. 591

Столярова Мария Вячеславовна, 5 курс
Пензенский Государственный Университет, естественно-научный
Свойства материалов для чувствительных элементов информационных систем
Научный руководитель: Аверин Игорь Александрович, к.ф.-м.н.
E-mail: micro@diamond.stup.ac.ru стр. 592

Стручков Николай Федорович, инженер
Институт Физико-Технических Проблем Севера СО РАН, отделение материаловедения и хладостойкости

Сравнительные металлографические исследования структуры и свойств газотермических покрытий из порошковых проволок.

Научный руководитель: Винокуров Геннадий Георгиевич, к.т.н.

E-mail: struchkov_n@rambler.ru стр. 593

Суздалов Илья Петрович, соискатель

Институт Физико-Технических Проблем Севера СО РАН,

Статистические характеристики структуры алмазметаллических композитов, полученных взрывным прессованием

Научный руководитель: Винокуров Геннадий Георгиевич, к. т. н.

E-mail: iliasuzdalov@mail.ru стр. 594

Тайсин Ильяс Фаизович, аспирант

Пермский Государственный Университет, физический

Анализ деформации кристаллической решетки H:Tl:LiNbO_3 методами рентгеновской дифрактометрии

Научный руководитель: Волынцев Анатолий Борисович, д.ф-м.н.

E-mail: taisin@psu.ru стр. 595

Тесленко Павел Юрьевич, 2 курс

Ростовский Государственный Университет, физический

Наноразмерные эффекты при синтезе ниобата калия

Научный руководитель: Кабиров Ю.В., к.ф-м.н.

E-mail: kupri@phys.rsu.ru стр. 596

Тимофеева Юлия Вячеславовна, инженер

Новгородский Государственный Университет,

Изучение дефектов структуры монокристаллических сплавов Bi+Sb методом двухкristальной рентгеновской топографии в геометрии Брэгга

Научный руководитель: Данильчук Леонид Нестерович, д.ф-м.н.

E-mail: dln@novsu.ac.ru стр. 596

Токмаков Алексей Викторович, аспирант

Красноярский Государственный Технический Университет, инженерно-физический

Исследование композиционных радиационно-защитных материалов

Научный руководитель: Кирко Владимир Игоревич, д.ф-м.н.

E-mail: tatyana@nifti.krasnoyarsk.ru стр. 597

Третьяков Семен Митрофанович, вед. инженер

Институт Физико-Технических Проблем Севера СО РАН, лаборатория высокоэнергетических технологий

Исследование эффективности использования отходов горнодобывающей промышленности в производстве износостойких наплавочных материалов

Научный руководитель: Винокуров Геннадий Георгиевич, к.т.н.

E-mail: tsm1982@mail.ru стр. 598

Улитин Антон Васильевич, 5 курс

Пензенский Государственный Университет, естественно-научный

Исследование морфологии поверхности и структуры эпитаксиальных пленок на основе халькогенидов свинца

Научный руководитель: Аверин Игорь Александрович, к.ф-м.н.

E-mail: micro@diamond.stup.ac.ru стр. 599

Уточкин Иван Геннадьевич, аспирант 3 года

Рязанская Государственная Радиотехническая Академия, электроники

Определение поверхностного потенциала пленок неупорядоченных полупроводников методом атомно-силовой микроскопии

Научный руководитель: Вишняков Николай Владимирович, к. т. н.

E-mail: utivan@dialup.etr.ru стр. 600

Хабибуллин Илдар Хайдарович, аспирант

Казанский Государственный Энергетический Университет, электронной техники и автоматизации

Исследование электронных свойств кубанита CuFe_2S_3

Научный руководитель: Матухин Вадим Леонидович,

E-mail: xildar@mail.ru стр. 602

Хайруллина Наталия Ароновна, аспирант
Челябинский Государственный Педагогический Университет, физический
Кинетика модификации спектров ЭПР при старении карбиноидных пленок
Научный руководитель: Песин Леонид Абрамович, д.ф.-м.н.
E-mail: po_nadu@cspi.urfu.ac.ru стр. 603

Чеботарев Сергей Сергеевич, аспирант 3 года
Челябинский Государственный Педагогический Университет, физический
Модификация структуры ПВДФ при глубокой радиационной карбонизации и последующей ионной бомбардировке
Научный руководитель: Песин Леонид Абрамович, д.ф.-м.н.
E-mail: sergius@cspi.ru стр. 604

Чернышев Вячеслав Валерьевич, 4 курс
Витебский Государственный Университет, физический
Управление мощностью излучения при спекании керамических материалов в СВЧ печи.
Научный руководитель: Савчук Владимир Кондратьевич, к.ф.-м.н.
E-mail: bokhan@vitebsk.by стр. 605

Шеваренков Денис Николаевич, аспирант 3 года
Нижегородский Государственный Университет, физический
Диэлектрические свойства поликристаллического ZnS
Научный руководитель: Щуров Александр Федорович, д.т.н.
E-mail: shevarenkov@phys.unn.ru стр. 605

Ширшов Илья Андреевич, аспирант 2 года
Уральский Государственный Университет, математико-механический
Зарождение двухфазной зоны в процессах направленной кристаллизации бинарных расплавов
Научный руководитель: Александров Д.В., д.ф.-м.н.
E-mail: chirchik@r66.ru стр. 607

Штарёв Дмитрий Сергеевич, 4 курс
Дальневосточный Государственный Университет Путей Сообщения, естественно-научный
Определение фоточувствительности различных химических форм висмута в светочувствительной композиции ПВС-ZnO-BiCl₃
Научный руководитель: Просанов Игорь Юрьевич, д.ф.-м.н.
E-mail: Shtarev@mail.ru стр. 608

Эльберг Мария Сергеевна, аспирант
Красноярский Государственный Технический Университет, инженерно-физический
Фазовые превращения в оксидах тяжелых металлов в условиях механоактивации
Научный руководитель: Кирко В.И., д.ф.-м.н.
E-mail: tatyana@nifti.krasnoyarsk.ru стр. 608

Юхнов Игорь Васильевич, 5 курс
Ростовский Государственный Университет, физический
Усталость сегнетомягкой керамики на основе ЦТС, модифицированной германием, при переполаризации
Научный руководитель: Гавриляченко Виктор Георгиевич, д.ф.-м.н.
E-mail: yuhnov@phys.rsu.ru стр. 609

Теоретический расчет тонкопленочных полевых транзисторов на основе неупорядоченных полупроводников

Авачев Алексей Петрович

Уточкин Иван Геннадьевич, Байдюв Александр Александрович

Рязанская Государственная Радиотехническая Академия

Вишняков Николай Владимирович, к.т.н.

avachev_a@fromru.com

Несмотря на промышленное использование неупорядоченных полупроводников, до сих пор остаются проблемы надежности, стабильности и долговечности работы приборов на их основе. Остается нерешенной задача создания удовлетворительных моделей формирования и работы физических структур и устройств, в частности, для тонкопленочных полевых транзисторов на основе аморфного гидрогенизированного кремния (a-Si:H ТПТ).

Теоретический анализ α -Si:H ТПТ необходим для оптимизации конструкции прибора, характеристик ТПТ. Использование аналитических выражений физики кристаллических полупроводников при рассмотрении a-Si:H ТПТ дает неудовлетворительный результат, так как не учитывается распределение и значение плотности локализованных состояний (ПЛС) в щели подвижности аморфного полупроводника. Поэтому в данном случае необходима значительная корректировка, обусловленная, во-первых, существованием непрерывного по энергии спектра локализованных состояний в запрещенной зоне, во-вторых, различием в механизмах переноса носителей. К настоящему времени разработаны модели a-Si:H ТПТ [1,2], которые могли бы быть включены в программы схемного моделирования. Существенным недостатком таких моделей является отсутствие аналитического выражения ТПТ и необходимость применения нескольких формул для описания всей области работы транзистора.

Отличительной особенностью предлагаемого расчета является тщательное слежение за промежуточными результатами, которые выводились в аналитическом виде и были представлены в графическом исполнении. Для проверки правильности хода расчета был проведен ряд экспериментов по снятию зависимостей поверхностного потенциала в слое a-Si:H от приложенного напряжения в структуре SiO₂/a-Si:H/Me. Результаты эксперимента представлены на рис. 1. В аналитическом виде связь между поверхностным потенциалом U_s и напряжением смещения на затворе ΔV для области пространственного заряда (ОПЗ) определяется зависимостью $U_s(\Delta V)$, которая была получена путем решения следующего уравнения:

$$U_s(\Delta V) = \Delta V - \frac{\varepsilon_s \cdot \varepsilon_0}{C_i} \cdot F(U_s) \quad (1)$$

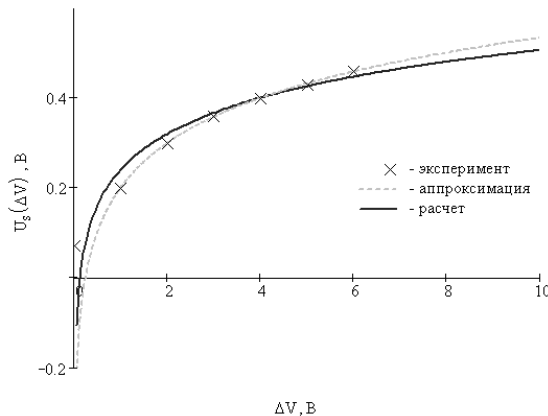


рис.1

Видно, что расчетная зависимость хорошо согласуется с экспериментом. На этом основании, экспериментальные точки были аппроксимированы логарифмической функцией. Решение этого уравнения с учетом граничных условий позволяет получить зависимость хода электростатического потенциала $U(x)$ от расстояния вблизи внутренней границы запирающего слоя при контакте металл – полупроводник [3].

В результате расчета ТПТ были получены аналитические выражения для выходных вольтамперных характеристик (ВАХ) транзистора:

$$I_{sd} = \sigma_0 \cdot \frac{W}{L} \cdot [A \cdot U_d + B \cdot (U_g \cdot U_d - \frac{U_d^2}{2}) - \sqrt{2 \cdot U_t \cdot \alpha \cdot L_n}], \quad (2)$$

где $A = d_s + L_d \cdot \frac{g_0 \cdot \varphi_{bi}}{n_0}$,

$$B = \frac{g_0}{n_0} \cdot \frac{\varepsilon_i \cdot L_d^2}{\varepsilon_s \cdot d_i} \cdot \left[\frac{\varepsilon_s \cdot d_i}{\varepsilon_i \cdot L_d + \varepsilon_s \cdot d_i} + \exp\left(\frac{\alpha \cdot \varphi_{bi}}{2}\right) \right] + \alpha \cdot \frac{\varepsilon_i \cdot L_n^2}{\varepsilon_s \cdot d_i} \cdot \exp\left(\frac{\varphi_{bi}}{2 \cdot q \cdot U_t}\right)$$

где W, L, d_s, d_i – геометрические параметры ТПТ; n_0 – концентрация свободных электронов в квазинейтральной области канала; g_0 – ПЛС в середине щели подвижности a-Si:H; α – наклон кривой, аппроксимирующей ПЛС; $\varepsilon_i, \varepsilon_s$ – диэлектрические проницаемости a-SiN и a-Si:H; φ_{bi} – разность работ выхода между металлом затвора и полупроводником, U_t – тепловой потенциал, U_g, U_d – напряжения на затворе и стоке ТПТ. Теория расчета может быть применена в качестве наглядной и удобной системы уравнений для разработчиков ТПТ на основе неупорядоченных полупроводников.

Все экспериментальные результаты для данной работы получены на АСМ «Solver Pro», производства компании NT-MDT г. Зеленоград. Работа ведется при финансовой поддержке Министерства образования Российской Федерации.

Список публикаций:

- [1]. M. Hack, M. S. Shur *Physical Models for Amorphous-Silicon Thin-Film Transistors and Their Implementation in a Circuit Simulation Program* // IEE Transactions on electron devices. Vol. 36. N 12. p. 2764-2769
 [2]. Меден А., Шо М. *Физика и применение аморфных полупроводников: Пер. с англ. М.: Мир, 1991. 670с*
 [3]. Авачев А.П., Вишняков Н. В., Уточкин И.Г., Мишустин В.Г. *Тонкопленочные полевые транзисторы на неупорядоченных полупроводниках. Проблемы расчета и применения. / Вестник Рязанской государственной радиотехнической академии. Выпуск 14, Рязань, 2004. С. 83-87*

Особенности применения рельсового ускорителя масс (рельсотрона) в морских условиях.

Адилов Зарахман Аиуралиевич

Санкт-Петербургский Государственный Технический Университет

Легуша Федор Федорович, проф., д.ф.-м.н.

Adilov79@mail.ru

Рельсовый ускоритель масс (РУМ) относится к классу электродинамических ускорителей масс (ЭДУМ) и является линейным ЭДУМ. Классический РУМ (рельсотрон) устроен следующим образом. Имеется источник постоянного электрического тока, клеммы которого присоединены к двум проводникам (рельсам). Рельсы размещаются в пространстве параллельно друг другу. На рельсы перпендикулярно их длине размещается проводник (якорь), который может свободно скользить вдоль поверхностей обоих рельсов. На сегодняшний день предложены два варианта реализации идеи РУМ: 1) для получения реактивной тяги (электромагнитный ракетный двигатель); 2) для пуска или разгона масс.

Метание тела с помощью рельсотрона впервые осуществлен в 40-е г.г. в Германии до скоростей порядка 1 км/с при массе 10 г. Разгон плазмы до скоростей около 100 км/с впервые был осуществлен в СССР в 1957 г.[1]. Интерес к РУМ особенно возрос в связи с работами проведенными группой исследователей Австралийского национального университета, когда тело массой 2,3 г было разогнано с помощью плазменного поршня (ПП) до 5,9 км/с.

Рельсотроны различают по типу источника питания (сосредоточенный или распределенный источник питания), по ускоряемому телу (якорю) (проводящее твердое тело, плазменный поршень с диэлектрическим телом или сложный якорь), по числу пар рельсов (одновитковый (классический) или N-витковый) и по другим параметрам.

Для применения при морских условиях предпочтителен рельсотрон с проводящим твердым телом, особенно многовитковый. Недостатками такого рельсотрона являются твердотельный скользящий контакт рельс – якорь и паразитные массы якоря.

Несмотря на то, что у рельсотрона с ПП отсутствуют проблемы организации высокоскоростного контакта и представляет потенциальные возможности достижения скоростей > 10 км/с, ряд недостатков такого рельсотрона ограничивает возможности их применения при морских условиях. Прежде всего это связано с большими трудностями формирования и поддержания ПП при ускорении массивных тел и большими тепловыми потоками в стенки канала от ПП, резко уменьшающими срок службы канала.

Для нужд ВМФ (гранатометание, бомбометание, торпедная стрельба, старт ракет, катапультирование самолетов и др. [2]), при ограничениях на длину участка разгона, решение задачи разгона связано с увеличением ускоряющей силы.

Величину ускоряющей силы в первом приближении можно определить из выражения:

$$F = 0,5LI^2, \quad (1)$$

где L - погонная индуктивность, I - сила тока.

Видно, что для увеличения ускоряющей силы необходимо увеличение силы тока и погонной индуктивности. Увеличение силы тока приводит к увеличению тепловых потерь в источнике питания, системе коммутации, линии передач и напряженности в конструкции канала рельсотрона и якоря. Поэтому и предпочтителен многовитковый рельсотрон, который представляет из себя несколько пар рельсов, соединенных последовательно друг с другом и уложенных в штабель, запитываемых от одного источника питания [3]. За счет такого усложнения конструкции рельсотрона удастся увеличить погонную индуктивность и, соответственно, ускоряющую силу. Отсюда видна важность знания методов увеличения и расчета погонной индуктивности. Нами были рассчитаны погонные индуктивности для разных размерных модификаций пятивиткового рельсотрона и было подобрано оптимальное расстояние между штабелями рельсов (калибр рельсотрона). Поставлена задача определения распределения физических полей в канале и конструкции РУМ в морской воде.

Метание из системы типа рельсотрон не сопровождается форсом огня и дыма, не выделяются газы, так как не используются сжатые газы или продукты горения. Таким образом, отсутствие необходимости легко воспламеняющихся и взрывчатых веществ для рельсотрона и возможности уменьшения массы и габаритов представляют перспективные возможности применения РУМ в морских условиях.

Список публикаций:

- [1] Л.А. Арцимович, С.Ю. Лукьянов, И.М. Подгорный, С.А. Чувагин. Электродинамическое ускорение сгустков плазмы. // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1957. Т. 33. В. 1(7). С. 3-8.
[2] Ф.Ф. Легуша, А.В. Смольников. Анализ перспектив использования электромагнитных ускорителей масс для создания новых образцов морской техники. НМПК Военное кораблестроение России – “ВОКОР-2004”, СПб, 2004. [3] A.E. Poltanov, A.K. Kondratenko, V.N. Ryndin, I.I. Goncharov, A.P. Glinov. Multi-Turn Railguns: Concept Analysis and Experimental Results. Proc. 10-th Symp. Electromagnetic Launch technology. IEEE Trans. Magn., vol. 37, N1, 2001, pp. 457-461.

Влияние слабой конвекции на кристаллизацию расплава

Асеев Данил Леонидович

Уральский Государственный Университет

Александров Дмитрий Валерьевич, д.ф.м.н.

Danil.Aseev@usu.ru

Процессы направленного затвердевания играют важную роль во многих сферах науки и техники, поэтому их моделирование и изучение представляет большой научный и практический интерес. Однако, описание таких процессов довольно сложно, так как зачастую приходится иметь дело с нелинейными дифференциальными уравнениями в частных производных и задачами с движущимися границами.

Направленное затвердевание – это кристаллизация расплава или раствора, содержащего небольшую долю примеси другого вещества, вдоль четко выраженного направления. Традиционно, такие процессы описываются фронтальной моделью, в основе которой лежит так называемая граничная задача Стефана. Она основана на представлении о существовании границы раздела (фронта кристаллизации) между чистой твердой (кристалл) и чистой жидкой (расплав) фазами, на которой выполняются условия непрерывности, баланса или скачка для температурного и концентрационного полей. При решении такой задачи необходимо найти температурные и концентрационные профили в жидкой и твердой фазах, а также определить форму фронта и его скорость. Обычно считается, что фронт плоский. Однако при протекании процесса, плоская форма фронта кристаллизации, как правило, разрушается вследствие концентрационного переохлаждения (температура вещества перед фронтом опускается ниже температуры ликвидуса – температуры, при которой вещество начинает затвердевать). Благодаря этому, между чистой жидкой и твердой фазами образуется область, заполненная двухфазным веществом (дендритами, зародышами твердой фазы, межфазной жидкостью). Эта область называется двухфазной зоной. При развитии процесса затвердевания скрытая теплота, выделяемая растущими элементами твердой фазы в двухфазном слое, может снимать переохлаждение, в результате чего температура зоны выравнивается до температуры ликвидуса. Такая зона называется квазиравновесной. Известно, что внешние силовые поля (например, гравитация) или температурный градиент в расплаве могут вызывать конвективные движения в жидкости - свободную конвекцию. Последняя значительно осложняет процессы теплопереноса, происходящие в расплаве. Задача о направленном затвердевании в присутствии конвекции очень сложна для изучения, до сих пор в литературе не встречалось ее точных решений.

В работе проведено исследование установившегося (квазистационарного) процесса затвердевания в присутствии квазиравновесной двухфазной зоны. Конвекционный поток моделировался поступательным движением жидкости навстречу фронту кристаллизации, движением жидкости вдоль фронта пренебрегалось,

т.е. вся жидкость, которая натекает на кристалл, вмораживается в него. Подобное представление конвекции налагает жесткие ограничения на область применимости модели. Очевидно, что она пригодна лишь для описания слабой конвекции (например, незначительные колебания расплава в изложнице). Однако такое моделирование конвекции позволило сделать задачу одномерной, что открыло путь к построению ее точного решения. В работе удалось построить точное аналитическое решение нелинейной задачи, все характеристики процесса (температурные и концентрационные профили по всем фазам, доля твердой фазы в двухфазной зоне, скорость затвердевания и ширина зоны) определены при помощи формул или простых алгебраических уравнений. Полученные решения показали, что конвекция может значительно менять картину процесса затвердевания по сравнению с безконвективным случаем, вплоть до разрушения самого стационарного процесса. Кроме того, выведены рамки применимости одномерной модели, как и ожидалось из физических соображений, они оказались довольно узкими: очень малые скорости конвекционного потока. Однако, несмотря на это, с помощью рассматриваемой модели удалось предсказать основные свойства теплового процесса, осложненного свободной конвекцией. Например, выравнивание концентрации примеси и температуры по всему объему жидкости при усилении конвекции.

Полученные в работе результаты представляют как научный, так и практический интерес. Они позволяют предсказывать физические и механические свойства сплавов и отливок, получаемых в результате кристаллизации.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов № 04-02-96002 (РФФИ Урал), № 04-02-96008 (РФФИ Урал), № Y1-PME-05-02 (CRDF и Минобрнаука РФ в рамках программы BRNE), REC: EK-005-00 [X1] (CRDF).

Автомодельная кристаллизация с двухфазной зоной

Асеев Данил Леонидович

Малыгин Алексей Павлович

Уральский Государственный Университет

Александров Дмитрий Валерьевич, д.ф.-м.н.

Danil.Aseev@usu.ru

Направленная кристаллизация бинарных расплавов является одним из способов получения твердых материалов, качество которых полностью определяется физическими и режимными параметрами процесса затвердевания. Хорошо известно, что при определенных условиях перед плоским фронтом затвердевания может возникать концентрационное переохлаждение [1], которое приводит к появлению метастабильной области перед фронтом. В этой переохлажденной области возможен рост кристаллов в форме дендритов, объемная кристаллизация на включениях примеси и т.д. Так как эта зона является переходной между уже сформировавшимся кристаллом и расплавом, она получила название двухфазной.

В случае образования двухфазной зоны картина кристаллизации меняется коренным образом. В частности, становится неприменимой классическая термодиффузионная модель Стефана. Для описания процесса кристаллизации можно использовать одну из математических моделей [2]-[4]. Однако, следует отметить, что в современной научной литературе существует множество других моделей процесса затвердевания с двухфазной зоной, учитывающих различные особенности последней. Одной из целей данного исследования явилось определение самого момента рождения двухфазной зоны и скорости затвердевания при различных теплофизических параметрах, характеризующих процесс кристаллизации. Установление времени образования двухфазной зоны определяет и временные рамки применимости модели Стефана для описания хода затвердевания.

В настоящем исследовании построены приближенные аналитические решения модели, описывающей автомодельный процесс направленной кристаллизации от охлаждаемой стенки изложницы в присутствии двухфазной зоны. Решения построены в виде разложений объемной доли твердой фазы и концентрации примеси в ряды по пространственной координате. Температурное и концентрационное поля, распределение объемной доли твердой фазы в двухфазной зоне, ее протяженность и скорость процесса, определенные приближенно, хорошо согласуются с результатами численных расчетов работы [5]. Кроме того, в работе построено точное аналитическое решение задачи, описывающее момент образования двухфазной зоны, соответствующее стремлению доли твердой фазы в двухфазной зоне к единице. Это точное аналитическое решение нелинейной проблемы качественно описывает образование расколов и трещин в формирующихся ледяных массивах Арктики и Антарктики.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов № 04-02-96002 (РФФИ Урал), № 04-02-96008 (РФФИ Урал), № Y1-PME-05-02 (CRDF и Минобрнаука РФ в рамках программы BRNE), REC: EK-005-00 [X1] (CRDF).

Список публикаций:

[1]. Г.П. Иванцов, Доклады АН 81 (1951) 179.

- [2]. R.N. Hills, D.E. Loper and P.H. Roberts, *Q.J. Mech. Appl. Math.* 36 (1983) 505.
[3]. D.V. Alexandrov, A.G. Churbanov and P.N. Vabishchevich, *Int. J. Fluid Mech. Res.* 26 (1999) 248.
[4]. A.C. Fowler, *IMA J. Appl. Math.* 35 (1985) 159.
[5]. M.G. Worster, *J. Fluid Mech.* 167 (1986) 481.

Структура и свойства стали Ст3 подвергнутой равноканальному угловому прессованию

Борисова Мария Захаровна

Институт Физико-Технических Проблем Севера СО РАН

Яковлева Софья Петровна, к.т.н.

bormaria@yandex.ru

Прирост прочностных свойств конструкционных сталей возможен за счет целенаправленного формирования микро- и нанокристаллической структуры. Одним из путей измельчения среднего размера зерна является интенсивное пластическое деформирование. В настоящее время в основном используют два метода получения больших пластических деформаций без формоизменения заготовок: кручение дисковых заготовок в наковальнях Бриджмена и равноканальное угловое прессование (РКУП) цилиндрических заготовок. Преимущество второго метода заключается в получении массивных образцов, что расширяет возможности их практического применения. Сущность метода заключается в продавливании заготовки в специальной оснастке через два пересекающихся канала с одинаковым поперечным сечением, на плоскости пересечения которых в образцах происходит однородная деформация простого сдвига высокой интенсивности. Метод РКУП обеспечивает равномерную деформацию всего объема заготовки и позволяет получить практически беспористые образцы. Многократное повторение цикла обработки обеспечивает в задаваемом исходном сечении большую степень деформации.

Поскольку на данный момент основное внимание ученых направлено на изучение влияния РКУП на свойства пластичных материалов, таких как медь, алюминий и их сплавов, свойства сталей, подвергнутых РКУП, остаются мало изученными. С другой стороны, стали, в силу своей доступности, оставляют широкое поле для исследования и практического использования. Если удастся с помощью РКУП улучшить свойства конструкционных сталей, то на рынок выйдут материалы, не уступающие по прочностным характеристикам высоколегированным сталям и даже превосходящие их в пластичности и запасе прочности, но в несколько раз дешевле. Исходя из этих предпосылок, при проведении работ в Институте физико-технических проблем Севера СО РАН было решено основное внимание уделить именно конструкционным сталям [1].

В качестве материала исследования была выбрана Ст3, как широко используемая в том числе в условиях холодного климата, конструкционная сталь.

Были поставлены следующие задачи: 1) исследование структуры стали Ст3, формирующейся при различных маршрутах РКУП; 2) определение механических характеристик образцов, подвергнутых РКУП по различным маршрутам.

Образцы стали Ст3 Ø20x80 мм подвергли РКУП с углом пересечения каналов 120° при температуре 450-500°C в два прохода маршрутами Вс (после каждого прохода заготовка поворачивается вокруг своей продольной оси на угол 90°) и С (после каждого прохода заготовка поворачивается вокруг своей продольной оси на угол 180°).

Методы исследования:

- исследование микроструктуры на световом микроскопе NEOPHOT 32 Carl Zeiss Jena,
- измерение микротвердости по Виккерсу на микротвердомере Ломо ПМТ-3М с нагрузкой 2 Н и выдержкой 10 с на образцах в виде брусков,
- измерение механических характеристик по испытаниям на одноосное растяжение плоских образцов при температурах 20°C и -40°C на двухтонной испытательной машине фирмы «UTS» с механическим приводом.

Размер зерна в исходном состоянии составлял 16-18 мкм; уже после двух проходов РКУП он уменьшился до 4-6 мкм. В ходе механических испытаний было установлено, что механические характеристики Ст3, подвергнутой РКУП, в 1,5-2,5 раза выше чем у исходного материала. Микротвердость возросла от 470 МПа до 775 МПа (маршрут Вс) и 810 МПа (маршрут С). Предел текучести σ_T возрос от 250 МПа до 660 МПа (для маршрутов Вс и С), а предел прочности σ_B от 450 МПа до 685 МПа (маршрут Вс) и 685 МПа (маршрут С). Таким образом видно что различия по прочностным характеристикам для Ст3 при РКУП по маршрутам Вс и С незначительны. С понижением температуры испытания наблюдается повышение механических характеристик материалов. При температуре испытания -40°C для маршрута Вс: $\sigma_T=695$ МПа, $\sigma_B=705$ МПа, а для маршрута С: $\sigma_T=695$ МПа, $\sigma_B=720$ МПа. С понижением температуры значение модуля Юнга снижается с 15000 МПа до 13000 МПа.

Из проведенных исследований видно, что: 1) уже после двух проходов РКУП заготовок стали Ст3 средний размер зерна уменьшается 4 раза; 2) образовавшаяся мелкозернистая структура обеспечивает высокие прочностные характеристики, превышающие исходные в 1,5-2,5 раза. Прирост твердости после РКУП составил 65% (маршрут Вс) и 75% (маршрут С). Поскольку отсутствуют существенные различия между свойствами, приобретенными материалом после РКУП маршрутами Вс и С, оба способа прессования подходят для практического применения.

Список публикаций:

[1] М. З. Борисова. Особенности нано(субмикро)-кристаллических материалов, полученных РКУП. Ежегодная XVI международная интернет-конференция молодых ученых и студентов по современным проблемам машиноведения (МИМКУС ПРОБМАШ 2004), декабрь 2004, www.imash.ru

О механизме наработки радионуклидов методом активации двухфазных мишеней на электронных ускорителях

Бураева Елена Анатольевна

Марескин Сергей Антонинович

Ростовский Государственный Университет, НИИ Физики

Давыдов Михаил Гаврилович, д.ф.м.н.

Nucllab.davidov@mail.ru

Способ получения водных растворов радионуклидов с использованием активации двухфазных мишеней (водных суспензий) в пучке тормозного излучения электронных ускорителей реализован нами для получения радионуклидов-реперов [1], часть которых были введены в калибровочные источники [2]. Из исследованных 22 мишеней только для половины были получены приемлемые относительные выходы ядер отдачи в раствор ($W=1-9\%$) и удельные активности ($A_0=5-120\text{КБк/л}$). Для остальных мишеней $W=0,1-0,6\%$, в том числе для мишени CaF_2 выход ^{18}F $W=0,2\%$. Повысить W целевых радионуклидов снижением размеров частиц твердой фазы до величин порядка пробегов ядер отдачи, то есть переходу от использования грубодисперсных ($1-10^2\text{мкм}$) к тонкодисперсным ($10^{-1}-10^{-3}\text{мкм}$) твердой фазы. Нами опробована другая возможность – использование термо- и радиационно-стимулированной диффузии ядер отдачи. Эта возможность изучена в данной работе для получения ^{18}F активацией мишени $(\text{C}_2\text{H}_4)_n\text{-H}_2\text{O}$ в пучке тормозного излучения при $E_0=22\text{МэВ}$. Оценка максимального выхода ^{18}F из фторопластовой пленки толщиной 80мкм при этих условиях активации ($E_{\text{яо}}^{\text{max}}\cong 560\text{кэВ}$ $R_{\text{яо}}=0,10\text{мкм}$) дает $W=0,06\%$. Как экспериментально показано в [3] за счет термодиффузии можно получить $W=3,5-7,5\%$ для пленок толщиной $80-200\text{мкм}$ при их активации в «сухом» виде и последующем отжиге в водной фазе при 200°C .

В наших экспериментах за счет активации в водной фазе и последующего отжига при температуре 200°C был получен $W=24,5\pm 1,1\%$ (рис.1), так как исключена потеря ^{18}F при разгерметизации контейнера с «сухой» мишенью, как в [3].

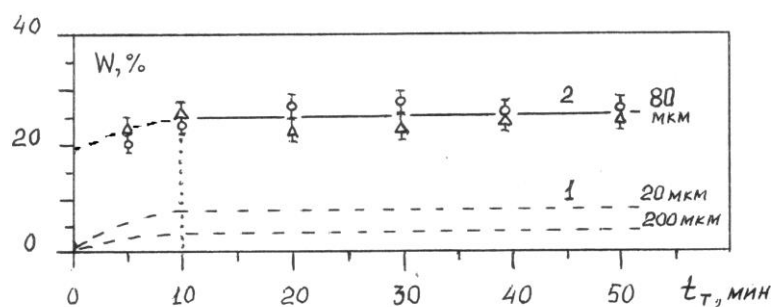


рис.1

Список публикаций:

[1] Бураева Е.А., Давыдов М.Г., Марескин С.А., Рахманов И.Б., Шварцман Н.Е. Выход радионуклидов в водные растворы при фотоактивации двухфазных мишеней тормозным излучением энергией 20,5 МэВ. Атомная энергия, т.94, вып. 5, май 2003г. с. 391-397.

[2] Бураева Е.А., Давыдов М.Г., Марескин С.А.. Калибровочные источники (меры активности) гамма-излучения на основе фоновой почвы. Атомная энергия, т.96, вып. 3, март 2004г. с. 237-242.

[3] Кучер А.М., Пенионжиевич Ю.Э., Флеров Г.Н. Некоторые особенности образования и выхода фтора-18 из тефлона под действием нейтронов и гамма-квантов. Припринт ОИЯИ №P14-6315, Дубна ОИЯИ, 1972, 15с.

Локальная и электронная структура кластеров железа интeколлeрированных в углеродные нанотрубки

Великохацкий Дмитрий Александрович

Ростовский Государственный Университет

Яловега Галина Эдуардовна к.ф.-м.н., Солдатов Александр Владимирович д.ф.-м.н.

yalovega@ctsnet.ru

В последнее время большой интерес вызывают исследования, посвященные нанотрубкам и нанокластерам, что вызвано широким и успешным применением этих объектов в современных технологических процессах. Настоящая работа посвящена исследованию структуры кластеров Fe помещенных в углеродные нанотрубки. Целью данной работы было определить оптимальный размер и геометрическое строение кластеров помещенных в углеродные нанотрубки разного размера.

Для этого был проведен теоретический анализ экспериментальных спектров поглощения углеродных трубок, внутрь которых были внедрены кластеры железа. Было создано несколько моделей кластеров железа: 1 атом, 13 атомов и 42 атома железа в структуре ОЦК, которые были внедрены в трубки диаметром 10 и 220 А, и для этих моделей проведен теоретический анализ спектров поглощения за К –краем железа (рис.1).

Обнаружено, что теоретические спектры для этих моделей имеют хорошее согласие с экспериментальными спектрами чистого железа в структуре ОЦК, что говорит о том, что железо внутри нанотрубки формирует кластеры достаточно большого размера.

Fe K-edge in carbon nanotube D=100A

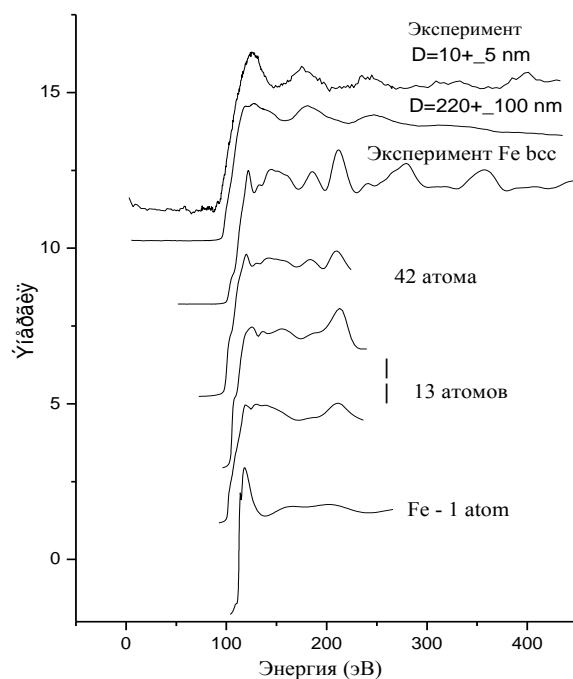


рис.1

Использование химических сдвигов C1s-линии для расчета концентрации фтора в частично карбонизованном ПВДФ.

Волегов Алексей Анатольевич

Чеботарёв Сергей Сергеевич, Евсюков Сергей Евгеньевич, Грибов Игорь Васильевич,

Кузнецов Вадим Львович, Москвина Наталья Анатольевна

Челябинский Государственный Педагогический Университет

Песин Леонид Абрамович д.ф.-м.н.

voligov@cspu.ru

При исследовании фотоэлектронной эмиссии поливинилиденфторида (ПВДФ) воздействие немонахроматического рентгеновского излучения и потока вторичных электронов на поверхность образца приводит к её дегидрофторированию (ДФ). Высокий вакуум, достигаемый в камере фотоэлектронного спектрометра, препятствует окислению карбонизируемой поверхности, которое неизбежно при химическом ДФ

ПВДФ. Данный эффект открывает перспективу разработки нового (радиационного) метода синтеза одномерного углерода (карбина).

Для оценки общего уровня и динамики карбонизации поверхности полимера важное значение имеет измерение относительной концентрации фтора и углерода. Обычно эта процедура достаточно сложна, а получаемые с ее помощью данные следует оценивать критически. Во-первых, она требует непрерывной, последовательной регистрации фотоэлектронных спектров углерода и фтора. Во-вторых, поскольку кинетические энергии $C1s$ -, $F1s$ - и $F2s$ - фотоэлектронов существенно отличаются, необходим учет различной длины их свободного пробега в веществе и, соответственно, различной толщины анализируемого слоя поверхности. В-третьих, следует знать функцию пропускания спектрометра, определение которой требует достаточно трудоемких специальных измерений. Поэтому поиски более простых и точных способов измерения концентрации фтора актуальны как для сокращения времени регистрации спектров и уменьшения продолжительности и сложности их обработки, так и для увеличения достоверности результатов.

Мы предлагаем способ, который основан на существовании химических сдвигов $C1s$ - линии атомов углерода в сторону больших энергий связи для тех атомов углерода, которые химически связаны с одним или двумя атомами фтора (2,3 и 4,6 эВ соответственно). Помимо определения относительной концентрации атомов фтора, данный метод позволяет производить измерение содержания CF - и CF_2 групп при различной продолжительности карбонизации.

Обработка $C1s$ - спектров включала несколько этапов. Сначала производилась коррекция спектров для исключения эффекта немонокроматичности AlK_{α} излучения. Затем вычитали постоянную составляющую фона, а начало отсчета энергии связи совмещали с максимумом $C1s$ - линии для исключения возможного влияния электростатической зарядки. Полученная спектральная кривая описывалась четырьмя функциями: тремя экспоненциальными и одним обычным гауссианом (см. вставку на рисунке). Ширины всех этих функций были определены из описания модельной $C1s$ - линии и не изменялись в процессе подгонки. Положения максимумов всех кривых фиксировались при значениях 0; 2,3; 4,6; 9,4 эВ соответственно. Специальная программа итеративно автоматически подбирала интенсивности функций 1–4 до наилучшего совпадения с экспериментальной кривой. Относительная концентрация CF - и CF_2 - групп вычислялась путем деления площади под кривыми с максимумами при 2,3 и 4,6 эВ соответственно на сумму площадей под первыми тремя кривыми. Гауссиан с центром при 9,4 эВ использовался для описания особенности фона, происхождение которой пока остается неясным, но предположительно связано с модификацией комбинированной плотности состояний при карбонизации.

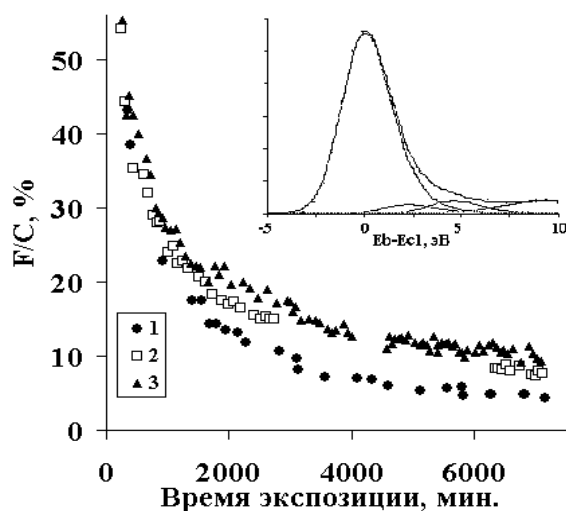


рис.1

На рисунке приведены зависимости относительной концентрации атомов фтора в ПВДФ от времени экспозиции рентгеновским излучением, которые вычислялись нами по стандартной методике из отношений интенсивностей спектров $F1s/C1s$, $F2s/C1s$ (серии точек 1, 2 соответственно), а также по предложенной выше методике (серия точек 3). Все приведённые зависимости демонстрируют уменьшение относительной концентрации фтора с увеличением времени экспозиции. Однако ход их различен. Этот факт объясняется, по-видимому, тем, что при увеличении продолжительности карбонизации ПВДФ возникает градиент плотности вещества по глубине.

На первый взгляд, представляется удивительным, что концентрация атомов F, усредненная по слою промежуточной толщины (серия точек 3) оказывается наибольшей.

Объясняется это кажущееся несоответствие тем, что при использовании стандартной методики мы предполагали отношения длин свободного пробега $F1s/C1s$ и $F2s/C1s$ фотоэлектронов, постоянными. В действительности, при неоднородном изменении плотности образца длины свободного пробега изменяются с неодинаковой скоростью. Поэтому, зависимости 1 и 2 дают соответственно завышенный и заниженный результаты.

Предлагаемая методика позволяет избежать необходимости учета соотношения длин свободного пробега и их изменений, поскольку анализируются фотоэлектроны, имеющие одинаковую глубину выхода.

Синтез и структура марганецсодержащих перовскитов

Гарбузова Анна Михайловна

Ростовский Государственный Университет

Рудская Анжела Григорьевна, к.ф.-м.н.

rudskaya@phys.rsu.ru

В последнее десятилетие пристальное внимание уделяется наноматериалам и соответствующим нанотехнологиям, которые могут быть использованы в нанoeлектронике. Однозначное понятие наноразмерного состояния еще не сформулировано. Большинство исследователей считают, что это понятие относится к кристаллитам от 1 до 100 нм. Мы считаем, что к наноразмерным состояниям вполне относятся блоки идеальности в реальных кристаллах или кристаллитах достаточно больших размеров. Наличие таких блоков идеальности в реальных кристаллах является следствием разных дефектов и разной их концентрации. Анализ обширной литературы по наноматериалам показывает, что в подавляющем числе исследований методами рентгеноструктурного анализа определяются размеры блоков идеальности (области когерентного рассеяния).

В процессе синтеза веществ методами рентгеноструктурного анализа можно наблюдать развитие кристаллического состояния от наноразмерных масштабов до макрокристаллических. В нашей работе мы использовали созданный измерительно-вычислительный комплекс "Рентген-Структура".

Интересно отметить, что при исследовании таких процессов структурообразования можно наблюдать и обратные процессы: переход от макрокристаллических состояний исходных для синтеза реактивов к наноразмерным.

В работе исследовались наноразмерные эффекты в марганецсодержащих перовскитах, среди которых мы синтезировали несколько новых ранее неизвестных, таких как $(\text{Pr,Cd})\text{MnO}_3$, $(\text{Pr,Bi})\text{MnO}_3$, $(\text{La,Cd})\text{MnO}_3$, $(\text{La,Bi})\text{MnO}_3$ а также $(\text{Y,Ca})\text{MnO}_3$.

Установлено, что наноразмерная перовскитовая фаза LaMnO_3 ($D < 15 \text{ нм}$) образуется уже при 400°C . При более высоких температурах синтеза (600°C) она превращается в две перовскитовые фазы состава $\text{LaMn}^{3+}\text{O}_3$ и $\text{La}_{2/3}\text{Mn}^{4+}\text{O}_3$. При температурах $950 < T < 1000^\circ\text{C}$ окончательно образуется стехиометрическая фаза LaMnO_3 . Учет таких особенностей синтеза LaMnO_3 позволил провести синтез всех изучаемых твердых растворов типа $A'A''\text{MnO}_3$ ($A'—\text{La}$ и Pr ; $A''—\text{Cd}$ и Bi) с образованием устойчивой перовскитовой фазой. Для этих объектов определен полный набор структурных параметров (симметрия, параметры ячейки, позиционные и тепловые параметры атомов) и изучены фазовые переходы в областях $20 \leq T \leq 1000^\circ\text{C}$.

Аналогичные исследования проведены для системы $(\text{Y,Ca})\text{MnO}_3$.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (проект № 04-03-32039а)

Температуропроводность системы Fe – Sn в окрестности температуры Кюри

Герасимова Наталья Витальевна

Каракулов Олег Евгеньевич

Ижевский Государственный Технический Университет

slokam@mail.ru

Нами было исследовано поведение температуропроводности в окрестности температуры Кюри для сплавов Fe + 0,3; 0,5; 1; 2; 5 и 7 ат% Sn. Как видно (см. рис. 1) температуропроводность исследованных систем имеет четко выраженный минимум вблизи температуры Кюри.

Известно, что переход из ферромагнитного в парамагнитное состояние является фазовым переходом второго рода, при этом многие физические свойства в окрестности перехода имеют свои особенности. Так температуропроводность ниже температуры Кюри имеет степенную зависимость вида $a^{-1} \sim A|T - T_c|^\gamma$, выше температуры Кюри соответственно $a^{-1} \sim A'|T - T_c|^{\gamma'}$, спонтанная намагниченность ферромагнетика, M , может быть описана ниже точки Кюри выражением $M = B(T_c - T)^\beta$, а магнитная восприимчивость задается выражением $\chi = C|T - T_c|^{-\alpha}$, где α , β , γ - соответственные критические показатели; T_c - температура Кюри; A , B , C - константы.

На рисунке хорошо прослеживается тенденция к уменьшению температуры, соответствующей минимальному значению температуропроводности, с увеличением концентрации Sn, при этом значение

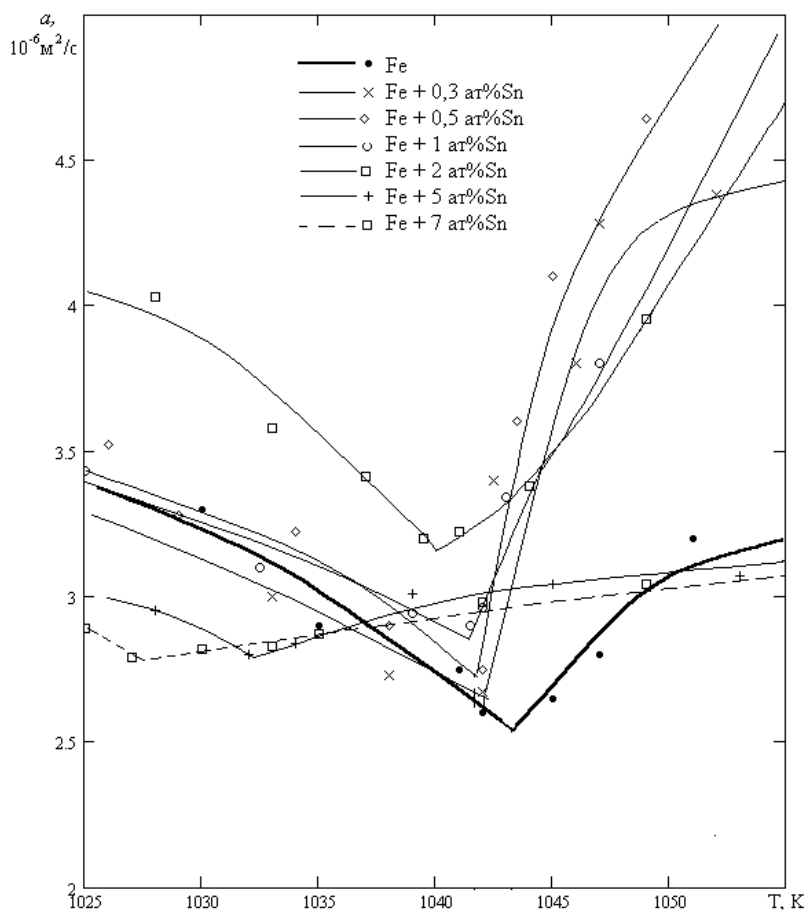


Рис.1

температуропроводности исследованных сплавов в точке Кюри с увеличением концентрации Sn возрастает, имеет максимальное значение для сплава с содержанием 2 ат% и в дальнейшем уменьшается. Видно, что с увеличением концентрации, особенно для 5 и 7 ат % Sn минимум “размывается”. Такое поведение температуропроводности вблизи температуры Кюри можно объяснить рассеянием на магнитных неоднородностях.

Нанокристаллические оксиды олова, кремния и индия как основа для газочувствительных сенсоров

Грачева Ирина Евгеньевна

Максимов Александр Иванович, Юшков Иван Андреевич

Санкт-Петербургский Государственный Электротехнический Университет

Луцкая Ольга Федоровна, к.ф.-м.н.

IEGrachova@mail.ru

Перспективными материалами для изготовления газочувствительных элементов сенсорных устройств являются полупроводниковые металлооксидные слои на основе диоксида олова, отличающегося уникальным сочетанием свойств: высокой адсорбционной способностью, высокой чувствительностью проводимости к состоянию поверхности, большой шириной запрещённой зоны и высокой механической и химической прочностью. Введение в диоксид олова каталитической добавки оксида индия повышает чувствительность датчиков к этанолу, метану, угарному газу, аммиаку, водороду [1]. При эксплуатации сенсорных устройств в области повышенных температур проявляются процессы рекристаллизации наноконструкций, поэтому для стабилизации микроструктуры нанокристаллиты диоксида олова и оксида индия вводились в прочную матрицу рентгеноаморфного диоксида кремния. Наиболее удобным и экономичным способом получения таких наноконструкционных материалов является золь-гель метод, являющийся синтезом последних достижений нанотехнологии и коллоидной химии.

В золь-гель технологии исходные компоненты находятся в жидком состоянии, их смешение происходит на молекулярном уровне, благодаря чему достигается возможность получения материалов заданного состава и структуры. Предположительно считается, что задерживающиеся ионы хлора в неорганической сетке аморфной матрицы диоксида кремния ухудшают газочувствительные свойства, поэтому растворы-золи были приготовлены тремя способами с использованием солей олова и индия с разными анионами: 1 – в качестве

прекурсоров использовались тетраэтоксисилан (ТЭОС), олово двухлоритое 2-водное и азотнокислый индий; 2 – ТЭОС, олово двухлоритое 2-водное и серноокислый индий; 3 – ТЭОС, серноокисное олово и серноокислый индий. Были приготовлены растворы-золи следующих составов: $10 \text{ SiO}_2 - 85 \text{ SnO}_2 - 5 \text{ In}_2\text{O}_3$; $10 \text{ SiO}_2 - 80 \text{ SnO}_2 - 10 \text{ In}_2\text{O}_3$; $10 \text{ SiO}_2 - 75 \text{ SnO}_2 - 15 \text{ In}_2\text{O}_3$. В среде изопропилового (или бутилового) спирта возможно получать гомогенные, без расслоений, золи (спирт играет роль растворителя). Хлористоводородная и серная кислоты использовались в качестве катализатора золь-гель процесса. Алкоксиды металлов подвергались частичному или полному гидролизу. Приготовленный раствор-золь разливался на поверхность подложки, предварительно обработанной в спирте, и распределялся с помощью центрифуги (2000 об/мин). В процессе нанесения на поверхности подложки в тонком слое золя происходит более полный гидролиз алкооксидов с последующей поликонденсацией и образованием пространственных структур в виде гелей. Свежеполученные гели представляют собой студнеобразные продукты, неорганическая структура которых удерживает воду, органические растворители, не вступившие в реакцию вещества. При термической обработке гелей происходит образование оксидов металлов из неорганических солей; интенсивное выделение летучих компонентов, сопровождающееся значительной потерей веса, уплотнение плёнок; улучшение сцепления плёнок с поверхностью подложки; увеличение механической и химической прочности плёнок; переход геля в ксерогель (тонкий стекловидный слой, толщиной 0.1 мкм).

Фазовый состав нанокompозитов исследован на порошках гелей, полученных из исходных растворов, методом рентгеновского фазового анализа (РФА) и сопоставлен с измерениями газочувствительности с использованием паров этилового спирта. Выбраны оптимальные температуры отжига нанокompозитов, выше и ниже которых чувствительность к этиловому спирту уменьшалась (ниже оптимальной температуры отжига кристаллизация оксидов олова и индия не полностью завершена, а выше происходит рост кристаллитов, что уменьшает поверхность взаимодействия с адсорбируемыми газами). При использовании первого способа приготовления растворов-золей оптимальная температура отжига нанокompозитов – 600 °C, при использовании второго – 700 °C, при выборе третьего – 900 °C.

Подобран оптимальный температурный диапазон измерения газочувствительности 320-350 °C, выше и ниже которого чувствительность к этанолу уменьшается. Внутри диапазона температур 100-320 °C сопротивление полупроводниковой пленки увеличивается, т.к. преобладает адсорбция кислорода и десорбция воды, причем с увеличением температуры адсорбция кислорода на поверхности металлооксидной пленки растет (следовательно возрастает чувствительность к газу реагенту). А в интервале температур 350-500 °C преобладает десорбция молекул кислорода, поэтому газочувствительность с увеличением температуры в этом диапазоне температур уменьшается.

В работе исследовано влияние подложек различного типа на формирование полупроводниковых слоев на основе оксидов олова, кремния и индия с помощью растровой электронной микроскопии (SEM). Полученные микрофотографии свидетельствуют о наличии сетчатой структуры, различная геометрия которой оказывает существенное влияние на газочувствительные свойства нанокompозитов.

Список публикаций:

[1] S. Shukla, S. Seal, L. Ludwig, C. Parish. *Nanocrystalline indium oxide-doped tin oxide thin film as low temperature hydrogen sensor. Sensors and Actuators. B 97 (2004) 256-265.*

Дефектообразование в кремнии, легированном гафнием

Далиев Шахрух Хожакбарович

Национальный Университет Узбекистана

Власов Сергей Игоревич, д.ф.-м.н.

shahrik1985@yandex.ru

Известно, что в детекторах инфракрасного (ИК) излучения детектирование ИК-излучения и обработка соответствующих электрических сигналов осуществляются в общем кремниевом кристалле. Это и явилось главным стимулом сравнительно быстрого развития исследований и разработок многоэлементных ИК-приемников на примесном кремнии в последние годы. Поэтому исследования в области ИК-приемников направлены на поиск новых, более совершенных материалов со стабильными и воспроизводимыми характеристиками. Примером таких материалов и является кремний, легированный переходными и тугоплавкими элементами.

В связи с этим нами изучалось влияние атомов гафния на поведение атомов Mn в Si. В качестве исследуемых образцов использовался монокристаллический кремний n-типа проводимости с удельным сопротивлением $5 \div 100 \text{ Ом}\cdot\text{см}$.

Атомы Hf вводились в Si в процессе выращивания, а затем диффузионным путем вводился марганец из нанесенного слоя хлорида марганца в интервале температур 900-1200°C в течение 2 часов. Охлаждение образцов после диффузии Mn производилось с различными скоростями. В качестве контрольных использовались образцы n-Si, термообработанные при тех же условиях, что и введение Mn в Si.

Измерения спектров DLTS образцов n-Si<Hf> показали, что в заметной концентрации каких-либо глубоких уровней (ГУ) не наблюдается, хотя по данным нейтронно-активационного анализа содержание атомов гафния, довольно высокое: $2 \cdot 10^{16} \div 5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Следовательно, атомы гафния находятся в объеме Si в электрически нейтральных состояниях.

Анализ и сопоставление спектров DLTS образцов n-Si+ВТО, n-Si<Mn> и n-Si<Hf+Mn> показывают, что наличие атомов Hf в объеме Si, также, как и атомов редкоземельных элементов в Si приводит к снижению эффективности термического дефектообразования: концентрация ГУ $E_c-0,23\text{эВ}$ значительно ниже в образцах n-Si<Hf+Mn>, чем в n-Si+ВТО.

Кроме того, установлено, что концентрации глубоких уровней $E_c-0,42\text{эВ}$ и $E_c-0,54\text{эВ}$, связанных с атомами Mn в образцах n-Si<Hf+Mn> значительно выше, чем в образцах n-Si<Mn>. Из этих данных можно сделать вывод, что наличие атомов Hf в решетке Si повышает эффективность образования центров марганца в кремнии.

Кроме того, эксперименты с низкотемпературными обработками образцов n-Si<Mn> и n-Si<Hf+Mn> показали, что атомы Hf в некоторой степени стабилизируют свойства уровней марганца в кремнии: в присутствии Hf отжиг ГУ $E_c-0,42\text{эВ}$, связанного с марганцем в состоянии (Mn^0) в кремнии происходит в 5-6 раз медленнее, чем в образцах n-Si<Mn>, а ГУ $E_c-0,54\text{эВ}$, связанный с кластерами (Mn^0)₄ в образцах n-Si<Hf+Mn> не отжигается вообще.

Таким образом, анализируя полученные результаты можно сделать следующие выводы. Нами ранее было показано, что введение Mn в Si приводит к повышению фоточувствительности кремния. Дополнительным легированием n-Si<Mn> атомами гафния нам удалось повысить эффективность образования центров марганца в Si и стабилизировать их свойства. Получение легированного материала с высокой фоточувствительностью и стабильными и воспроизводимыми параметрами позволит создать высокоэффективные фотоприемники для инфракрасного диапазона.

Кристаллографическая модель фазового перехода B2-R в сплавах на основе TiNi

Дементьева Марина Геннадьевна

Томский Государственный Университет

Клопотов Анатолий Анатольевич, д.ф.-м.н.

Artifakt83@mail.ru

За последние годы возрос интерес к сплавам, обладающими эффектами памяти формы (ЭФП). Среди материалов с ЭФП особое место занимают и сплавы на основе никелида титана. Они находят широкое применение, как в технике, так и в медицине. Для понимания механизмов превращений кристаллических структур в сплавах на основе никелида титана представляется важным провести исследования детального механизма фазовых переходов в этих сплавах.

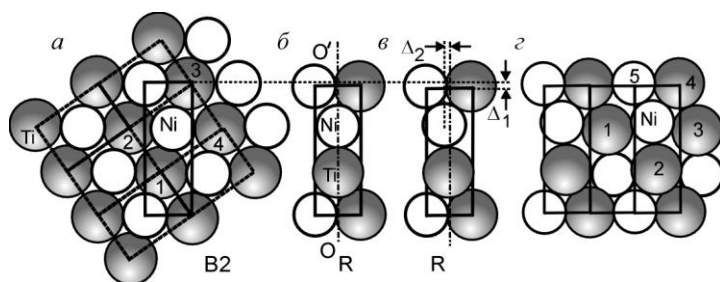


рис. 1. Схема расположения атомов Ti и Ni в плоскости (110) в структуре B2 (а). Варианты образования "линейного дефекта"

R-фазы (б-в) и положения атомов после образования R-фазы (г)

интерметаллидах TiNi и AuCd. В литературе существует разные модели перехода B2-R. В нашей работе за основу ФП B2-R был взят переход ОЦК-ГПУ и с наличием смещений, переводящих одну решетку в другую. Классическими представителями такого перехода являются переходы A2- ω в Ti и Zr.

На *рис. 1* приведена схема расположения атомов в плоскости (110) в структуре B2 и фрагмент "линейного дефекта" R-фазы в масштабе с соответствующими размерами атомов Ti ($R_{\text{Ti}}=0.146$ нм) и Ni ($R_{\text{Ni}}=0.124$ нм) и размерами параметров элементарных ячеек, характерных для B2 и R фаз. На *рис. 1 б-в* представлена модель "линейного дефекта" в кристаллической решетке фазы B2, вызванного волной продольного смещения $2/3\langle 111 \rangle_{\text{B2}}$. При перестройке кристаллической решетки, атомы смещаются навстречу друг другу внутри ячейки вдоль направления $\langle 111 \rangle_{\text{B2}}$ и занимают симметричные положения относительно оси

В данной работе проведено исследование перестройки кристаллической решетки при фазовом переходе B2-R с использованием кристаллогеометрической модели «жестких» шаров с постоянным диаметром D с целью выявления закономерности в изменении параметров элементарных ячеек, и, как следствие, изменение атомных объемов в зависимости от сорта атомов легирующих элементов.

Переход B2-R реализуется как мартенситное превращение в

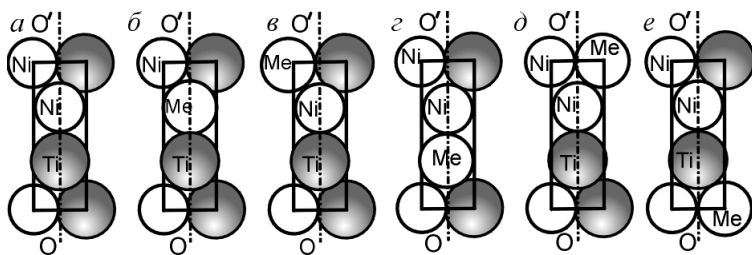


рис. 2. Варианты замещения легирующим элементом Me атомов Ti и Ni в плоскости $(110)_{B2}$ в области “линейного дефекта” R-фазы (б-е). $R_{Ni} \leq R_{Me} < R_{Ti}$

ОО'. Такое смещение атомов приводит к сжатию решетки в области “линейного дефекта” в B2-фазе, который имеет структуру R-фазы. Видно, что в этом случае, когда атомы разного сорта имеют разные радиусы, то в плоскости $(110)_{B2}$ атомы Ni имеют контакты только с 4 атомами Ti (рис. 1 а). В случае, если величина смещений атомов Ni и Ti разная и величина смещения атома Ni на Δ_2 меньше, чем атома Ti (рис. 1, в). При этом атом Ni имеет еще один контакт с атомом Ni (атом с цифрой 5 на рис. 1, г). Все это приводит

к увеличению плотности упаковки атомов в R-фазе.

На рис. 2 приведены варианты замещения атомов Ti и Ni легирующим элементом в плоскости $(110)_{B2}$ в области “линейного дефекта” R-фазы. Видно, что величина смещения Δ_2 и величина сжатия решетки в области “линейного дефекта” Δ_1 R-фазы зависит от варианта замещения атомов Ti и Ni легирующим элементом и его размера. Проведен расчет и анализ как различия между размерами атомов легирующих элементов, при перестройке кристаллической решетки B2-R, влияет на величину сжатия Δ и как это связано с объемными изменениями при ФП.

На основе результатов исследований получены следующие выводы:

- В бинарных сплавах, если в них будут происходить переходы B2-R, то эти переходы будут сопровождаться значительными дилатационными изменениями (о чем свидетельствует величина сжатия Δ). Величина этих изменений тем больше, чем больше разница между размерами атомов разного сорта с ростом.

- Большая величина сжатия Δ в бинарных сплавах, которая сопровождает в этом случае ФП B2-R, должна приводить к большим напряжениям при переходе и, следовательно, может компенсировать тот выигрыш свободной энергии, связанный с перестройкой кристаллической решетки. Это, возможно, способствует подавлению ФП B2-R(ω). Поэтому наиболее благоприятная ситуация для осуществления ФП B2-R, когда величина дилатационных изменений минимальная.

- В тройных сплавах на основе TiNi, наоборот присутствие третьего элемента в локальных местах уменьшает величину дилатационных изменений. Установлено, что чем больше разница между размерами атомов Ti легирующего элемента, тем меньше дилатационные изменения. Такие изменения способствуют меньшим упругим напряжениям, которые возникают в результате фазового перехода. Полученные данные коррелируют с тем положением, что переход B2-R близкий к ФП II рода. А это приводит к тому, что при образовании зародышей новой фазы нет необходимости преодолевать значительный энергетический барьер.

Исследование структуры наплавленного порошкового материала с модифицирующими добавками

Демидов Николай Александрович

Институт физико-технических проблем Севера СО РАН

С. П. Яковлева, к.т.н.

Tsm1982@mail.ru

В настоящее время модифицирующие добавки часто используются для улучшения свойств порошкового материала. Применение модификаторов повышает износостойкость, обуславливает измельчение кристаллического зерна и увеличение пластичности. Поэтому разработка новых способов модифицирования является актуальной научно-практической задачей, требующей своего решения.

В данной работе модифицирующие добавки использованы в виде материалов шихты электродов для наплавки. Актуальность работы также определяется необходимостью использования местного минерального сырья для изготовления электродного покрытия.

В качестве основного материала использовались промышленный порошок ПГ-СР4 и стандартная шихта на основе рутила для производства электродов марки МРЗ и УОНИ 13/55. Модифицирующие добавки составляли 5%, 10%, 15% от массы шихты, которая составляла 3 кг. В качестве связующего элемента шихты и порошка использовалось жидкое стекло, которое составляло 30% от массы шихты. Предварительно перемешанная шихта с ультрадисперсными добавками заливалась жидким стеклом, далее прессованием были получены цилиндрические брикеты. Спрессованные брикеты использовались для получения сварочных

электродов из прутков диаметром 4мм. Полученные электроды просушивались в открытом сухом воздухе в течение 24 часов. После этого сушка проводилась 3 часа в сушильном шкафу при температуре 300°С.

Полученными электродами наплавлялся валик диаметром до 30-35 мм., длиной до 60 мм. Ток дуги 100 - 110 А, наплавка проводилась в нижнем положении. Для основы наплавки использовалась пластина толщиной 10 мм. марки Ст 3. Из полученных образцов были изготовлены шлифы для металлографических исследований. В данной работе исследованы микроструктура наплавленного материала и зоны сплавления (рис.1).



рис.1. Фотографии микроструктуры при увеличении 100^х:
а) наплавленный материал;
б) зона сплавления;
в) основной металл.

Математическое моделирование образования шероховатости, при кислородной газолазерной резке малоуглеродистой стали

Ермолаев Григорий Викторович

Новосибирский Государственный Университет

Ковалев Олег Борисович д.ф-м.н.

gve@ngs.ru

Кислородная газолазерная резка (ГЛР) применяется при раскромке листов малоуглеродистых сталей толщиной вплоть до 20-25мм. Использование кислорода, в качестве рабочего газа, позволяет увеличить скорость резки почти в 3 раза, по сравнению с не реагирующими с металлом газами. Характерной особенностью ГЛР является наличие периодических структур (или штрихов) на поверхности реза. С увеличением толщины материала их ширина и глубина возрастают, а качество поверхности ухудшается. На поверхности газолазерного реза выделяют несколько зон, отличающихся характером шероховатости поверхности. Общепринятой модели образования штрихов на данный момент не существует. В работе предлагается физико-математическая модель возникновения штрихов с учетом влияния химических реакций окисления при кислородной газолазерной резке малоуглеродистой стали.

Экспериментальные результаты исследования, процессов образования штриха, при различных параметрах ГЛР содержатся в работе [1]. По зависимостям шага штриха от скорости резки обнаружено скачкообразное уменьшение размера штриха от 200-300 мкм до 100-150 мкм в момент превышения скорости резки некоторого порогового значения. Так же обнаружено, что пороговая скорость увеличивается с повышением давления в форкамере сопла. Наиболее распространенной является качественная модель [2], рис. 1. Модель применима только при скоростях резки меньше пороговых. Предполагается, что основным механизмом образования штриха является циклическая реакция окисления железа в кислороде. При этом пороговая скорость резки отождествляется с линейной скоростью окисления железа. Количественного описания явления образования штриха при кислородной ГЛР металлов в настоящее время в мировой литературе отсутствует, что связано со сложностью описания реакции окисления железа в высокоскоростной струей чистого кислорода.

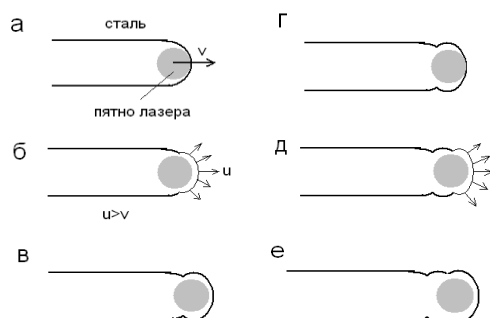


Рис 1. Вид на лазерный рез сверху в различные моменты времени.

а) Начальный момент, луч лазера касается передней кромки и движется со скоростью резки v .

б) Металл нагревается, и начинается интенсивное окисление железа, передняя кромка движется вперед со скоростью $u > v$. Происходит отрыв передней кромки реза от луча лазера.

в) За счет теплопроводности металла температура передней кромки реза падает, реакция прекращается, и движение кромки останавливается.

г), д), е) Луч лазера догоняет кромку и цикл повторяется.

Математическая постановка задачи основана на использовании метода фиктивных областей [3] для решения нестационарного уравнения теплопроводности (1) в плоскости пластины с каналом реза без явного выделения границы фазового перехода. Движение границы канала происходит за счет плавления металла и гетерогенной химической реакции окисления железа. Лимитирующей фазой химической реакции является перенос кислорода к поверхности металла из пограничного слоя.

$$c_i \rho_i \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_i \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda_i \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{1}{H} \frac{\alpha W_{las}}{2\pi\sigma^2} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} ((x - (x_0 + v_{cut}t))^2 + y^2)\right) + Q_{chem}(x, y, T_{surom}), \quad (1)$$

где ρ_i, c_i, λ_i - плотность, теплоемкость и теплопроводность вещества, определяется по агрегатному состоянию и предполагаемому химическому составу, T_{surom} - температура поверхности оксид-металл, α - коэффициент поглощения излучения веществом, W_{las} - мощность лазерного излучения, σ - характерный размер пучка, v_{cut} - скорость передвижения луча лазера относительно металла, x_0 - начальное положение центра пучка и струи кислорода, H - формальная толщина пластины металла, Q_{chem} - тепловой эффект химической реакции. В области канала реза значения параметров $\rho_i, c_i, \lambda_i, Q_{chem}, \alpha$ полагались равными нулю. Для решения (1) использовалась явная консервативная разностная схема.

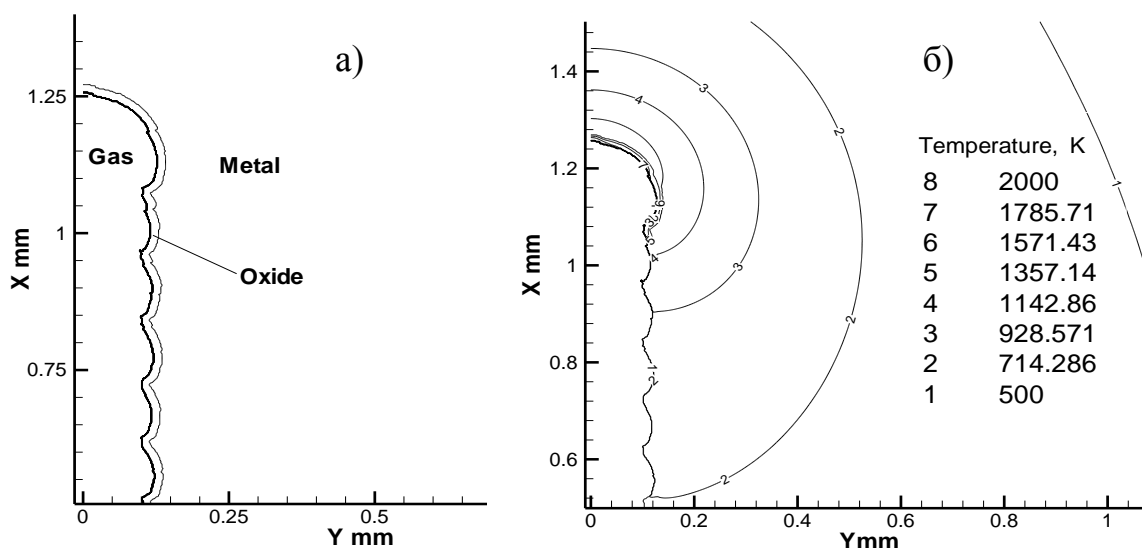


рис 2. Форма канал лазерного реза (а). Изолинии температуры (б).
 Параметры расчета: скорость резки 20 мм/сек, линейная мощность излучения 1000 Вт, коэффициент поглощения излучения 0.3, толщина материала 0.2 мм, диаметр лазера 180 мкм

Движение жидкой пленки не рассматривалось, ее толщина в расчетах задавалась и не превышала 15 мкм. Результат расчета формы канала лазерного реза для скорости меньшей скорости окисления представлен на рис. 2.

Проведенное моделирование подтвердило физический механизм образования штрихов при небольших скоростях резки, высказанный в [2], и качественно согласуется с экспериментальными данными [1]

Список публикаций:

[1]. Ermolaev G.V., Malov A.N., Malov N.A., Some peculiarities of oxygen-laser cutting of mild steel. Proceedings of XII International Conference on Methods of Aerophysical Research, Novosibirsk, 28 June-3 July 2004, part 3, page 113-118.
 [2]. William M. Steen, Laser material processing. London: Springer-Verlag, 1991.
 [3]. Kovalev O.B., Larkin N.A., Fomin V.M., Yanenko N.N. «The Solution of nonhomogeneous Thermal Problem and the Stefan Single Phase Problem in Arbitrary Domains» //J. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 1980.V.22. P.259-271.

Исследование теплопроводности монокристаллического кремния в интервале температур 50-300 К

Жирыков Алексей Васильевич

Попов Павел Аркадьевич

Брянский Государственный Университет

Попов Павел Аркадьевич, к.ф.-м.н.

tfbgubry@rol.ru

В настоящей работе абсолютным стационарным методом продольного теплового потока измерена теплопроводность κ трёх образцов монокристаллического кремния в интервале температур 50-300 К. Отличием методики измерений от описанной в [1] было отсутствие электрического контакта между образцом и спаями измерительных термодпар. Образцы представляли собой параллелепипеды 3x3x40 мм, расстояние между датчиками температуры составляло 20 мм. Погрешность определения величины теплопроводности не превышала 5%. Кристаллы имели различные значения удельного сопротивления, а один из них (№ 3) – аномально высокую плотность дислокаций - $2 \cdot 10^3 \text{ см}^{-2}$.

№ образца	Марка	$\kappa(50 \text{ К}), 10 \text{ Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$	$\kappa(300 \text{ К}), \text{ Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$
1	1А5Мб кеф 4,0/0,1 ТУ – 48-4-295-74	120	147
2	3А4 бис-кэф 0,1-45 ТУ – 48-4-295-74	115	148
3	ЭКДБ 0,35-136 ГОСТ 19658-74	93	143

Результаты измерений в виде графика зависимости $\kappa(T)$ представлены на рисунке (рис. 1).

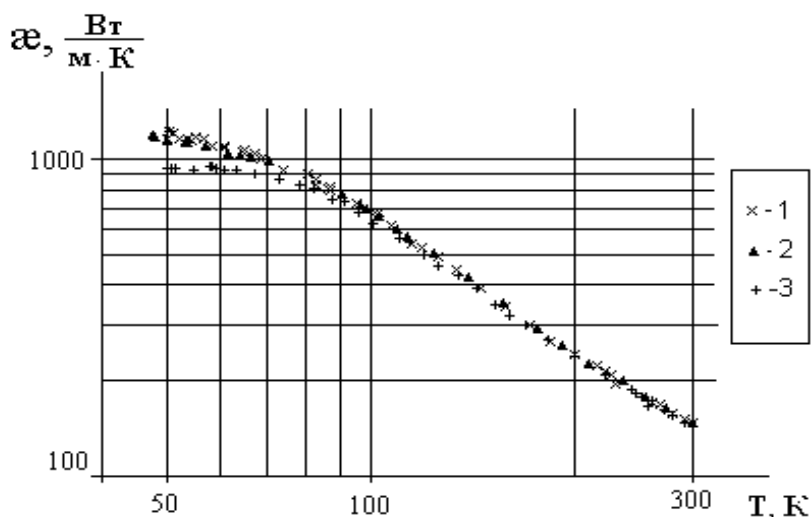


рис. 1.

Значения теплопроводности образцов № 1 и № 2, удельное сопротивление которых при комнатной температуре составляет 4,0 и 0,1 Ом·см соответственно, различаются менее чем на 5% во всём исследованном диапазоне температур и близки к соответствующим значениям для номинально чистых неотожжённых образцов кремния [2]. Дислокационный кристалл (№ 3) проявляет существенное тепловое сопротивление в области 50 К. Для получения дополнительной информации с целью выявления механизмов теплового сопротивления планируется провести измерения электропроводности в этом же температурном диапазоне на той же установке после соответствующей модификации.

Список публикаций:

[1] N. N. Sirota, P. A. Popov, I. A. Ivanov. *Crist. Res. Technol.*, 27, 535-543 (1992).

[2] Ред. Охотин А. С. *Теплопроводность твёрдых тел. Справочник*. М.: «Энергоатомиздат» (1984).

Применение метода гармонического анализа для изучения тонкой структуры графитированных материалов

Жуков Евгений Александрович

Челябинский Государственный Университет

Тюменцев Василий Александрович, д.х.н.

John_mad@74.ru

Физико-технические характеристики графитированных материалов определяются микроструктурой, на формирование которой влияют режимы термообработки, химический состав и структура исходного нанодисперсного углерода. Закономерности перехода такого углеродного материала в графит изучали дифракционными методами путем анализа изменения положения и интегральной ширины основных дифракционных максимумов. Однако, как правило, при обработке экспериментальных данных детальный анализ профилей максимумов 00ℓ не проводили, в результате чего теряется информация о величине $\Delta d/d$.

Исследования выполнены на образцах, отличающихся содержанием нанодисперсного углеродного волокнистого материала и количеством циклов обработок «пропитка в вакууме пеком – высокотемпературная обработка». Параметры тонкой структуры графитированных материалов исследовали методом рентгеноструктурного анализа (дифрактометр ДРОН-3, $\text{CuK}\alpha$ - излучение), в качестве эталона использовали кварц. Обработку профилей дифракционных максимумов 00ℓ проводили методом гармонического анализа.

В методе гармонического анализа для расчета параметров тонкой структуры используется два кратных дифракционных максимума, кроме этого еще необходимо эталон для устранения уширения линии, вызванного инструментальными причинами.

Величина средних размеров областей когерентного рассеяния рассчитывается по (1):

$$L = \frac{\lambda}{\Delta 2\theta \cdot \text{Cos} \theta_{\text{ЦТ}}} \left[\frac{dA(k)}{dk} \Big|_{k=0} \right], \quad (1)$$

где: λ - длина волны используемого излучения в \AA ;

$\Delta 2\theta$ - шаг записи профиля дифракционного максимума исследуемого образца в радианах;

$\theta_{\text{ЦТ}}$ - центр тяжести дифракционного максимума эталона.

Производная $\frac{dA(k)}{dk} \Big|_{k=0}$ от нормированных коэффициентов Фурье функции физического уширения

дифракционного максимума заменяется секущей, проведенной по коэффициентам с номерами $k = 1, 2, 3$ методом наименьших квадратов.

Величина относительной среднеквадратичной деформации определяется по (2):

$$\bar{e}(k) = \frac{d}{\pi} \cdot \frac{-\ln A(k)}{2} \cdot \frac{\Delta 2\theta \cdot \text{Cos} \theta_{\text{ЦТ}}}{\lambda}, \quad (2)$$

где d - межплоскостное расстояние в данном кристаллографическом направлении.

Образцы первой серии графитированных материалов (1, 2, 3, 4) отличаются процентным содержанием нанодисперсного волокна, добавленного вначале технологического процесса в дисперсный пековый кокс в количестве 0; 1; 4 и 5 масс.%. Образцы второй серии (5, 6, 7, 8) были получены по стандартной технологии производства электродного графита (5), путем дополнительной однократной (6), двукратной (7) и трехкратной (8) пропитки пеком и графитации при 2500°C .

На рисунке (рис.1) представлены профили дифракционных максимумов 002 исследуемых углеродных материалов первой серии. Как видно интегральная ширина β дифракционных максимумов образцов первой серии изменяется незначительно. По профилям дифракционных максимумов 002 и 004 методом гармонического анализа была получена зависимость параметров тонкой структуры – средних размеров областей когерентного рассеяния L_{002} и средней относительной величины $\Delta d/d$ от процентного содержания примесей волокна (рис.2). Как видно из этого рисунка, размеры L_{002} и величин $\Delta d/d$ уменьшаются с увеличением процентного содержания примесей.

Аналогичные исследования выполнены на образцах второй серии. Показано, что с увеличением количества циклов «пропитка в вакууме пеком – высокотемпературная обработка» средние размеры областей когерентного рассеяния L_{002} увеличиваются, в то же время средняя относительная величина $\Delta d/d$ изменяется

незначительно и соответствует значению порядка $1,4 \times 10^{-2}$. Резкое увеличение L_{002} установлено в образце, полученном в результате последовательной четырехкратной пропитки пеком и высокотемпературной термообработки.

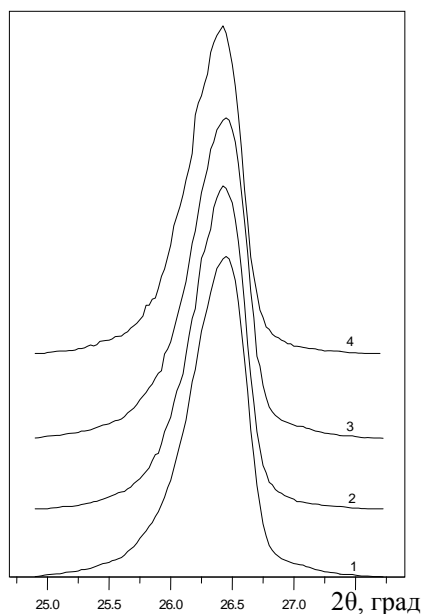


рис. 1. Профили дифракционных максимумов 002 графитированных углеродных материалов:
1 – материал не содержит добавку углеродного нановолокна; 2, 3, 4 – количество добавки углеродного нановолокна составляет 1, 4 и 5

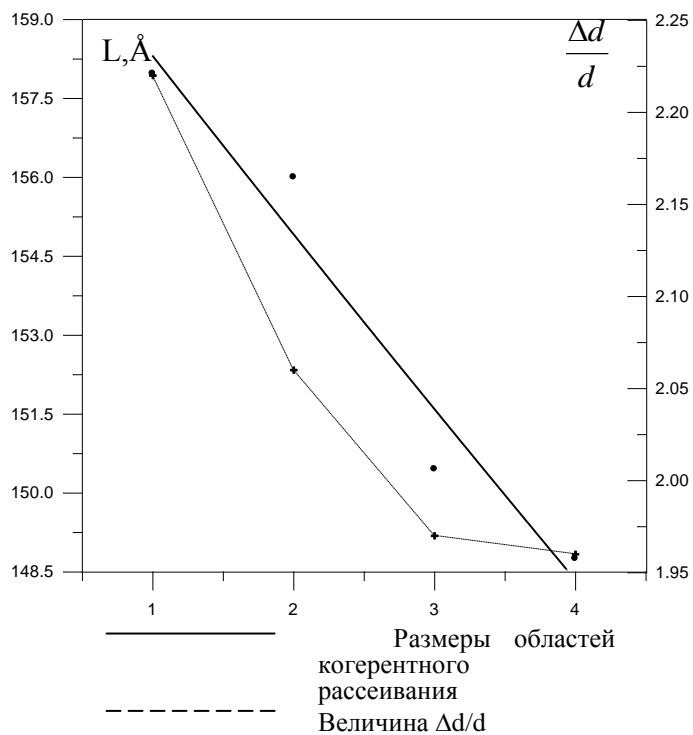


рис. 2 Изменение средних размеров областей когерентного рассеивания и величины $\Delta d/d$ от процентного содержания углеродного нановолокна в материале.

Программный комплекс и установка для исследования структурно-неоднородных сред и краевых явлений

Ишков Алексей Владимирович
Алтайский Государственный Университет
olg168@rambler.ru

Для исследования структурно-неоднородных материалов и краевых явлений на границе полимер-наполнитель нами был разработан комплекс программ, работающий в среде ОС Windows 95/98/2000/XP, и сконструирована соответствующая автоматизированная установка. Комплекс и установка позволяют исследовать распределение наполнителя в объеме полимерного композиционного материала (ПКМ), структурные изменения в материале под воздействием температуры, а также определять значения краевого угла смачивания, работу адгезии и поверхностное натяжение на границе полимер-наполнитель. Установка состоит из сменных рабочих частей: части предназначенной для исследования краевых явлений (рис. 1); части для исследования структурно-неоднородных материалов, представленной сканером высокого разрешения; электрической и программной частей. Комплекс состоит из управляющей программы, программы обработки изображений Analyzer, программы FracDim, позволяющей рассчитывать величину фрактальной размерности границ наполнителя (D) методом островов среза и методом клеток и программы Young, производящей вычисление краевого угла, расчет работы адгезии и поверхностного натяжения на границе полимер-наполнитель. Алгоритм всех программ реализован на языке Pascal в среде Borland Delphi v 6.0.

Исходными данными для комплекса является графический файл изображения шлифа образца ПКМ или капли полимера на поверхности наполнителя формата *.bmp, полученный с помощью сканера высокого разрешения или Web-камеры, подключенной к соответствующей системе. Файл обрабатывается программой Analyzer, происходит пошаговый автоматический поиск и идентификация границ наполнителя и преобразование изображения в черно-белое. Затем файл обрабатывается выбранной оператором второй программой. В одном случае, когда производится исследование ПКМ при воздействии на него температуры или при определении краевого угла смачивания, исходное изображение, преобразованное программой Analyzer в черно-белый файл bmp-формата, обрабатывается программой Young. Производится отыскание точки

соприкосновения трех фаз, аппроксимация криволинейной поверхности капли полимера полиномом второй степени, расчет производной в найденной точке и вычисление искомого угла. В другом случае (программа FracDim) на черно-белом изображении объекта происходит определение длины границ наполнителя и площади, занимаемой им поверхностью, и по соотношению этих величин с учетом разрешения сканера находится фрактальная размерность. Перед выполнением основного алгоритма программа проводит разбиение исходного изображения на 10 фрагментов, выбираемых случайно и представляющих исходное изображение не менее чем на 60 %. После выполнения основного алгоритма производится усреднение полученных значений и статистическая обработка результатов.

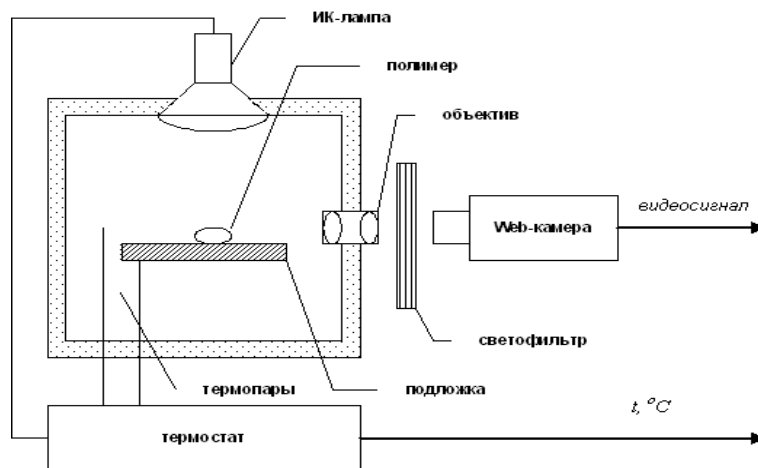


рис. 1. Схема рабочей части установки для исследования краевых явлений

Общее время счета комплекса установленного на ЭВМ класса Pentium IV для образца ПКМ размером 10×10 мм, сканированного с разрешением 4800 dpi, при исследовании структурирования наполнителя составляет 5-15 мин.

На установке нами были исследованы ПКМ на основе термостойких связующих ПАИС-104, СФП-012 АК-30, ЭД-20 с нестехиометрическими карбидами, нитридами и карбонитридами титана, безасбестовые фрикционные материалы, а также определены углы смачивания в системах нестехиометрический наполнитель-полимер. Было обнаружено структурирование наполнителя в ПКМ за границей области протекания. D ПКМ на границе протекания и сразу после нее находится в интервале 1,05-1,15, что отвечает структуре с единичными цепочечными проводящими каналами. При содержании наполнителя в ПКМ 25-40%, в зависимости от природы и стехиометрии наполнителя, происходит скачек D до величин 1,2-1,4, что соответствует образованию разветвленных проводящих каналов (доля разветвлений от общей длины каналов 10-12%). При переходе границы 50-60% нестехиометрического наполнителя происходит второй скачек – фрактальная размерность возрастает до 1,5-1,7 – происходит образование сеточной проводящей структуры. Исследование краевых явлений в указанных системах показало зависимость угла смачивания от природы, стехиометрии наполнителя и присутствия на его поверхности свободного углерода. При изменении указанных параметров и типа полимера взаимодействие в изученных системах изменялось от несмачивания ($\theta < 90^\circ$) до частичного или полного смачивания ($\theta > 90^\circ$).

Полученные результаты позволяют исследовать и однозначно характеризовать процессы структурирования наполнителей в структурно-неоднородных материалах, влияние на них различных факторов, а также управлять этими процессами, меняя свойства материала. Изучение краевых явлений на границе полимер-наполнитель с помощью разработанной установки позволяет быстро подобрать полимерную матрицу, наиболее совместимую с используемыми в составе материала наполнителями.

Структурирование проводящих наполнителей в композитах за границей протекания

Ишков Алексей Владимирович
Алтайский Государственный Университет
olg168@rambler.ru

В качестве перспективных проводящих наполнителей для создания электропроводящих полимерных композиционных материалов (ЭПКМ) для РЭА, способных заменить порошки драгоценных металлов, нами предлагается использовать карбиды, нитриды и карбонитриды титана различного состава. Эти соединения относятся к фазам включения, имеют электронную природу проводимости и отличаются высокой термической и химической стойкостью. Образование устойчивых проводящих структур внутри ЭПКМ происходит при достижении такого содержания наполнителя в композите, при котором в образце материала от одной грани до

другой образуются непрерывные цепочки контактирующих друг с другом частиц. Эту концентрацию проводящего наполнителя называют «порогом протекания». Для большинства ЭПКМ такой порог составляет 14-17 об. % и отчетливо проявляется на зависимости сопротивления от состава материала. При достижении порога протекания и далее вольтамперные характеристики ЭПКМ становятся линейными, так как природа контактов в материале омическая.

При получении ЭПКМ на основе нестехиометрических соединений титана и исследовании их свойств был обнаружен эффект структурирования указанных проводящих наполнителей в композитах за границей протекания. Такое структурирование наполнителя является отличительной особенностью исследованных материалов и служит дополнительным фактором, определяющим электрические свойства композита. Для ЭПКМ, полученных по схожим технологиям и содержащих проводящие наполнители с аналогичными свойствами (порошки металлов, посеребренный графит и т.п.), такой эффект не описан в литературе. Дополнительное структурирование в ЭПКМ на основе нестехиометрических соединений титана, термо- и реактопластов наблюдается при достижении содержания наполнителя 60-70 % (25-35 об. %) от массы материала (рис.1) и зависит не только от технологических особенностей получения материала, но и от вида полимера, природы и состава наполнителя.

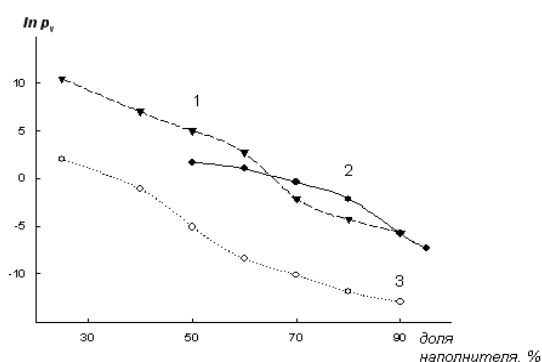


рис. 1. Зависимость сопротивления композиционного материала от содержания наполнителя:
 1 – $TiC_{0,9}$ в ЭД-20, 2 – $TiN_{0,5}$ в ПЭТФ, 3 – $TiC_{0,5}N_{0,4}$ в СФП-012 АК-30.

Так для материалов на основе терморезактивных связующих, полученных по порошковой технологии, перегиб на зависимости удельного объемного сопротивления от содержания наполнителя выражен более отчетливо, чем для ЭПКМ, полученных по растворной технологии, или на основе термопластичных полимеров экструзированием или вальцеванием. При прочих равных условиях структурирование нестехиометрических карбидов титана выражено более отчетливо чем нитридов или карбонитридов, то же происходит у материалов, содержащих свободный углерод на своей поверхности. Величина скачка сопротивления при структурировании зависит от состава (стехиометрии) конкретного наполнителя.

Для исследования этого явления нами были получены микрофотографии шлифов ЭПКМ различного состава, по которым была определена фрактальная размерность границ наполнителя (D) по специальной компьютерной программе. Величина D отражает тенденцию наполнителя к образованию развитых многомерных структур и тесно связана с их морфологией. Если никаких дополнительных процессов структурообразования в материале не наблюдается, то фрактальная размерность границ наполнителя будет монотонно возрастать с ростом содержания последнего в материале, пока не достигнет своего максимального значения. Однако, как видно из рис.2, при достижении композитом состава 60-70 % происходит скачкообразное изменение величины фрактальной размерности.

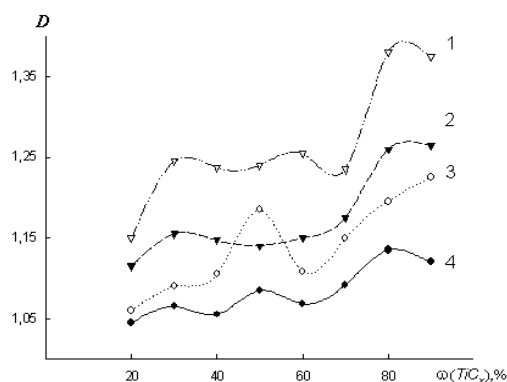


рис. 2. Зависимость фрактальной размерности границ наполнителя от состава материала:
 1 – $TiC_{0,75}$; 2 – $TiC_{0,6}$; 3 – $TiC_{0,9}$; 4 – $TiC_{0,5}$.

Таким образом, у исследованных ЭПКМ наблюдается новый эффект – структурирование проводящих наполнителей за границей протекания. Структурирование вызывает дополнительный рост электропроводности у высоконаполненных композитов и зависит от способа получения материала, вида полимера, природы и стехиометрии наполнителя.

Применение симплекс-планирования для случая рентгенофлуоресцентного анализа материалов широко изменяющегося состава.

Кирикович Марина Антоновна

Дубинина Юлия Александровна

Ростовский Государственный Университет

Дуймакаев Шамиль Исакович, к.ф.-м.н., Цветянский Александр Леонидович, к.ф.-м.н.

Yulia03@phys.rsu.ru

В работе [1] предложены уравнения связи, достаточно адекватно описывающие зависимость интенсивности флуоресцентного излучения от химического состава пробы. Однако решение системы таких нелинейных уравнений связано с определенными вычислительными трудностями.

В настоящей работе предлагается прием, позволяющий устранить необходимость решения системы уравнений при текущих определениях концентраций.

Для описания четырехкомпонентной системы Ni-Zn-Ge-Mo со значительными эффектами избирательного возбуждения выбираются обобщенные уравнения связи следующего вида:

$$C_i = \chi_i + \sum_{i \neq j} q_{ij} \chi_i \chi_j + \sum_{i \neq j} \gamma_{ij} \chi_i \chi_j (\chi_i - \chi_j) + \sum_{i \neq j \neq l} q_{ijl} \chi_i \chi_j \chi_l, \quad (1)$$

где C_i - концентрация i -того компонента пробы, q_{ij} , γ_{ij} , q_{ijl} - коэффициенты полинома, χ_i , χ_j , χ_l - относительные интенсивности аналитических линий соответствующих компонентов. Коэффициенты q_{ij} , γ_{ij} , q_{ijl} определяются независимо друг от друга.

Градуировка уравнений производилась с использованием матрицы планирования Шеффе [2]. При этом параметры обобщенных уравнений связи находились по составам, концентрация каждого компонента в которых изменялась в пределах от 0 до 100%. Такой подход целесообразен при отсутствии каких-либо сведений о количественном составе анализируемых проб.

Коэффициенты влияния рассчитывались путем решения системы линейных уравнений без привлечения МНК, т.к. в схеме Шеффе регрессионный план жестко связан с формой уравнения и число градуировочных образцов совпадает с числом рассчитываемых коэффициентов.

Показаны преимущества данного подхода по сравнению с подходом [3]. По данным двадцати определений для каждого элемента были получены относительные среднеквадратические погрешности 0,15%, 0,89%, 1,07%, 0,34%, в то время как, метод [3] дает 4,02%, 1,93%, 12,19%, 1,89% (погрешность в интенсивности флуоресценции не вносилась).

Обобщенные уравнения связи проверены на математической модели. Адекватность эксперименту выбранной теоретической модели интенсивности рентгеновской флуоресценции для насыщенных образцов проверена на основе экспериментальных данных работы [4]. Сопоставление рассчитанных и экспериментальных интенсивностей для одного и того же набора дает относительную среднеквадратическую погрешность на уровне 2%.

Таким образом, предложенные обобщенные уравнения связи позволяют анализировать образцы, на состав которых не накладываются никакие ограничения, а использование матрицы планирования эксперимента Шеффе позволяет рассчитать коэффициенты влияния.

Список публикаций:

[1] Блохин М.А., Белов В.Т., Дуймакаев Ш.И., Цопова-Гречишина Л.Н., Заводская лаборатория, 9, 1081-1085 (1973).

[2] Чемлева Т.А., Микешина Н.Г., В кн. Новые идеи в планировании эксперимента, 177-190 (1969).

[3] Белов В.Т., Дуймакаев Ш.И., Заводская лаборатория, 8, 958-960 (1974).

[4] Блохин М.А., Друзь В.В. Рентгеноспектральный анализ многокомпонентных смесей, Заводская лаборатория, 9, 1070-1074 (1963).

Магнито-импульсная метательная установка для проведения ударных испытаний материалов и изделий

Козлов Сергей Александрович

Владимирский Государственный Университет

Татмышевский Константин Вадимович, к.т.н.

piit@mail.ru

При исследовании поведения материала под действием импульсных ударных нагрузок основной задачей является ускорение макротел до сверхвысоких скоростей. Одним из перспективных методов ускорения тел является метод магнито-импульсного метания, описываемый законом Био-Савара-Лапласа. Метод заключается в возникновении механического ускорения проводящего тела вследствие взаимодействия образованного индуктором импульсного магнитного поля с наведенным им в проводнике вихревым током.

Метод магнито-импульсного ускорения тел положен в основу принципа действия магнито-импульсных установок, которые являются эффективным средством изучения поведения материалов и изделий (средств индивидуальной бронезащиты, узлов и блоков аэрокосмической техники (головных обтекателей, сенсорных систем и т.д.) при ударном нагружении методом прямого и обращенного пуска.

С целью проведения экспериментальных исследований разработан опытный образец магнито-импульсной установки. В его состав входят емкостный накопитель энергии, коммутирующее устройство, индуктор, пульт дистанционного управления, цифровой измеритель скорости метания.

При опытной эксплуатации подтверждены основные достоинства магнито-импульсного способа метания, а именно высокая производительность испытаний, воспроизводимость испытаний, бесшумность работы, отсутствие продуктов горения и взрыва в зоне испытаний, удобство и безопасность эксплуатации, широкая номенклатура метаемых изделий, малый путь разгона метаемого тела до максимальной скорости.

Для теоретической оценки возможностей метода магнито-импульсного метания разработана математическая модель, основой которой является уравнение движения проводящего тела под действием электромагнитных сил. Анализ полученной математической модели позволяет определить энергию, скорость и силу удара метаемого тела по преграде, а также оптимальный путь разгона и массу метаемого тела при заданных параметрах установки. Для анализа математической модели разработана программа, адаптированная под пользователя-конструктора.

Создание оптико-телевизионного метода для исследования состояния деформируемого твердого тела

Кондратьев Евгений Александрович

Томский Государственный Университет Систем Управления и Радиоэлектроники

Зариковская Наталья Вячеславовна к.ф.-м.н.

lama@ms.tusur.ru

Проблемы деформации твердых тел и локализации пластического течения изучаются на протяжении многих десятилетий, но до сих пор находится в стадии, далекой от завершения. В последние годы практически все новые подходы и развиваемые в области физики прочности механики пластичности оригинальные идеи в той или иной мере связаны с анализом причин и особенностей локализации пластического течения, наблюдаемого в процессе деформирования твердых тел.

Проведенные в последние годы исследования макронеоднородности пластического течения твердых тел, показали, что пластическое течение оказывается локализованным на всем протяжении процесса течения от предела текучести до разрушения. При этом формы локализации, которые могут быть увязаны с законом деформационного упрочнения (зависимостью коэффициента деформационного упрочнения от деформации), рассматриваются как варианты процессов самоорганизации дефектной структуры. Многочисленные исследования, проведенные на широком круге металлических материалов, различающихся типом кристаллической решетки (ГЦК, ОЦК, ГПУ), структурным состоянием (монокристаллы и поликристаллы с различной величиной зерна), механизмами пластической деформации (дислокационное скольжение, двойникование, деформация мартенситного превращения), позволяют представить общий вид наиболее характерных форм локализации деформации соответствующих различным стадиям деформационного упрочнения. Установлено, что во всех исследованных случаях в ходе пластического течения могут наблюдаться четыре типа локализации деформации: единичный движущийся по образцу фронт пластической деформации; согласованная система очагов локализации, синхронно движущихся вдоль оси растяжения; стационарная картина очагов пластического течения, находящаяся на одинаковом расстоянии друг от друга; единичный стационарный фронт. Наблюдаемые закономерности являются результатом самоорганизации пластического течения и могут рассматриваться как автоволны локализованной пластической деформации.

Однако в настоящее время не существует бесконтактного метода, дающего достаточное количество информации о материале в процессе деформации.

Все известные способы (и средства) неразрушающего контроля поверхности можно условно разделить на два типа:

1. Методы измерения топологии (рисунка),
2. Методы измерения микрорельефа.

Средства контроля первого типа основаны на поиске трещины поверхности. Наиболее развитыми к настоящему времени являются методы контроля второго типа, реализованные в виде измерительных приборов светового и теневого сечения профиля, микроинтерферометров, микропрофилометров, рефлектометров, растровых микроскопов и стереотелевизионных систем.

Общий недостаток всех существующих методов неразрушающего контроля - невозможность заранее предсказать место (область) разрушения поверхности материала, поскольку они либо регистрируют уже факт разрушения материала, например, появление трещин, либо их очень трудно использовать для оперативного контроля из-за громоздкости (исследования на растровом электронном микроскопе либо на с использованием голографической установки).

Для реализации такой системы необходимо построить математическую модель деформированного твердого тела, разработать алгоритм и написать программу, позволяющую по полученным изображениям поверхности получить информацию о местах локализации пластической деформации и о степени деформированности образца. Необходимо также получить четкие закономерности изменения изображения поверхности деформированных образцов со структурными исследованиями материалов.

Для модельного построения выбраны поликристаллический алюминий при нормальных условиях. Значения температуры и внешних воздействий приняты несущественными и не оказывающими влияние на структуру.

Основным преимуществом метода является возможность достаточно просто без особых на то усилий и дополнительных условий получать информацию о состоянии материала, на основании которой при помощи разработанного программного продукта будет даваться количественная оценка деформационных характеристик материала и рекомендации по дальнейшей эксплуатации.

При помощи данного программного продукта планируется осуществления мониторинга стальных и металлических конструкций (мостов, ЛЭП), что позволит дать своевременную оценку их эксплуатационных характеристик и дать оценку ресурсоспособности конструкции.

Реализация данного программного продукта будет произведена на основании экспериментальных данных полученных в институте физики прочности и материаловедения СО РАН и алгоритмов разработанных в СКБ «Микроэлектроника» ТУСУРа. Структурные исследования материалов, используемых в качестве экспериментальных образцов проведены в Сибирском физико-техническом институте.

Список публикаций:

- [1]. *On the acoustic properties and plastic flow stages of deforming Al polycrystals* / Zuev L.B., Semukhin B.S., Bushmeliova K.I., Zarikovskaya N.V. // *Materials Letters*. – 2000. – V.42. – No 1–2. – P.97–101.
- [2]. *Zuev L.B., Semukhin B.S., Zarikovskaya N.V. Deformation localization and ultrasonic wave propagation rate in tensile Al as a function of grain size* // *Int. J. Solids. Structure*. – 2003. – V.40. – No 4. – P. 941 – 950.
- [3]. *Зуев Л.Б., Семухин Б.С., Зариковская Н.В. Перестройка автоволновой структуры при деформации поликристаллического Al, ЖТФ* // – 2001. – Т. 71. – № 5. – С.57–63.

Эффективные коэффициенты электромеханической связи 0 – 3-комполитов «СПК – полимер»

Криворучко Андрей Владимирович

Безус Сергей Владимирович

Ростовский Государственный Университет

Тополов Виталий Юрьевич, д.ф.-м.н.

kolandr@rostov.ru

Комполиты со связностью 0–3, состоящие из сегнетопьезокерамических (СПК) включений и протяженной полимерной матрицы, характеризуются разнообразными физическими свойствами [1,2] и находят применения в современной пьезоэлектрической технике, акустике, твердотельной электронике и других областях. Для данной связности установлена существенная зависимость эффективных электромеханических свойств, пьезочувствительности и параметров приема комполитов от формы и взаимного расположения СПК включений [3-5]. Однако до настоящего времени не проводилось систематических исследований коэффициентов электромеханической связи (КЭС) этих и других пьезоактивных комполитов. Известно, что

КЭС характеризуют эффект преобразования мощности в пьезоэлектрическом материале и определяются как отношение плотности взаимной упругой и электрической энергии к среднему геометрическому значению плотности внутренних упругой и электрической энергий [6]. Цель настоящей работы – исследование концентрационных зависимостей и немонотонного поведения КЭС 0–3-композиов на основе СПК.

Рассматриваемый композит имеет ячеистую структуру (см. рис. 1) и характеризуется симметрией

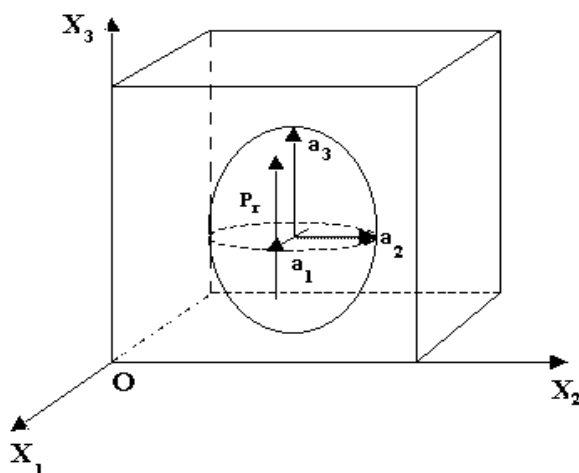


рис. 1

∞mm. Предполагается, что все включения имеют одинаковые размеры, а их сфероидальная форма задается уравнением $(x_1 / a_1)^2 + (x_2 / a_1)^2 + (x_3 / a_3)^2 = 1$ в осях прямоугольной системы координат $(X_1 X_2 X_3)$ образца, причем вектор остаточной поляризации P_r каждого включения сонаправлен с осью OX_3 и $a_1 = a_2$. Для описания пьезоэлектрического отклика 0–3-композиата и особенностей преобразования мощности при приложении электрического поля $E \parallel OX_3$ вводятся 11 различных КЭС [6], связанных с определенными системами граничных условий для полей упругих напряжений и деформаций. Все КЭС определяются по формулам [6] через эффективные упругие, пьезо- и диэлектрические константы, рассчитываемые методом эффективного поля [4,5] с использованием факторов Эшелби [7] для сфероидальных включений в трансверсально-изотропной пьезоактивной среде. В настоящей работе впервые получены и обсуждаются зависимости эффективных КЭС k^*_{3j} , k^*_{3j} ($j = 1;3$), k^*_p , k^*_t , k^*_h и др. от объемной концентрации m и отношения длин полуосей $\rho = a_3 / a_1$ сфероидальных включений. При этом параметры m и ρ задаются в интервалах $0 \leq m \leq 0.50$ и $0 < \rho \leq 1$. Расчеты проведены с использованием электромеханических констант перовскитовых СПК (на основе твердых растворов $(Pb_{1-x}Ca_x)TiO_3$ и $Pb(Zr_{1-x}Ti_x)O_3$) и полимеров (аральдит, полиуретан, сополимер фторида винилидена – трифторэтилена). Рассматриваются примеры немонотонного концентрационного поведения ряда КЭС (например, $k^*_{31}(m)$ и $k^*_p(m)$) и физические факторы, благоприятствующие такому поведению.

Список публикаций:

- [1] Newnham R.E., *MRS* 1 (5), 20-34 (1997).
- [2] Ng K.L., Chan H.L.W. and Choy C.L., *IEEE Trans. Ultrason., Ferroelec., a. Freq. Contr.*, 47, 1308-1315 (2000).
- [3] Levassort F., Lethiecq M., Millar C., and Pourcelot L., *IEEE Trans. Ultrason., Ferroelec., a. Freq. Contr.*, 45, 1497-1505 (1998).
- [4] Levin V.M., Rakovskaja M.I. and Kreher W.S., *Internat. J. Solids a. Struct.*, 36, 2683-2705 (1999).
- [5] Тополов В.Ю. и Глушанин С.В., *Письма в ЖТФ*, 28 (7), 38-45 (2002).
- [6] *Физическая акустика / Под ред. У. Мэзона*, 1, ч. А, М., Мир, 1966, 592 с.
- [7] Huang J.H., Chiu Y.-H. and Liu H.-K., *J. Appl. Phys.*, 83, 5364-5370 (1988).

Расчет некоторых термодинамических характеристик метанового гидрата кубической структуры I. Эффект самоконсервации

Крупский Дмитрий Сергеевич

Новосибирский Государственный Университет

Белослудов Владимир Романович, д.ф.-м.н.

kid_nsu@ngs.ru

В настоящее время в связи с сокращением запасов используемого органического топлива (нефть, уголь, газ) на планете производится активный поиск других источников энергии. Одним из наиболее перспективных источников являются газовые гидраты. Это возобновляемый ресурс, месторождения газовых гидратов находятся на материковых шельфах и, по некоторым оценкам, газа уже разведанных месторождений достаточно для сжигания такого количества кислорода, которое сравнимо с кислородом атмосферы, что дает примерное представление о запасах природного газа в виде гидратов.

В связи с тем, что газовые гидраты являются перспективным источником энергии, то уже сейчас существует огромное количество статей, посвященных различным их свойствам. Наиболее активно исследуется поведение гидратов при разных температурах и давлениях, а так же равновесие с различными другими фазами. В качестве таких фаз наиболее целесообразно рассмотрение льдов Ih и Ic, а так же морской воды. В настоящее время существует множество методов, позволяющих получать и исследовать газовые гидраты в лабораторных условиях. Также активно используются методы численного моделирования.

В данной работе изучалось уравнение состояния гидрата метана кубической структуры I с помощью метода решеточной динамики. Пакет программ, реализующий этот метод, является собственной разработкой нашей лаборатории. Получена зависимость объема от давления и температуры с использованием потенциалов SPC, TIP4P и модифицированного потенциала SPC, дающего большее соответствие экспериментальным данным в сравнении со стандартным потенциалом SPC. Так же исследовано поведение пустой решетки гидрата кубической структуры I и льда Ih.

Расчеты показывают большое отличие в абсолютной величине свободной энергии в зависимости от выбора модельного потенциала, но хорошее согласование в величине относительных изменений свободной энергии в зависимости от температуры и объема элементарной ячейки. Для гидрата метана, расширяющегося согласованно со льдом (т.е. с тем же относительным изменением объема), получено увеличение давления на 15-20 атмосфер при повышении температуры на 1 градус Цельсия, что может служить объяснением обнаруженному экспериментально эффекту самоконсервации – сохранение твердого гидрата при температурах около нуля Цельсия. Предположительно, это происходит следующим образом: поверхность гидрата нагревается, метан уходит в окружающую среду, а пустая решетка гидрата превращается в лед, который препятствует дальнейшему выходу метана и образует защитную рубашку вокруг гидрата. Гидрат метана может существовать в такой ледяной рубашке практически до точки плавления льда, т.е. до нуля градусов Цельсия.

Особенности применения методов анализа форм профилей рентгеновских дифракционных максимумов для исследования углеродных материалов

Курган Валентина Николаевна

Челябинский Государственный Университет

Беленков Евгений Анатольевич, д.ф.-м.н.

belenkov@csu.ru

Углеродные материалы - искусственные и природные графиты, углеродные волокна, углеситаллы и др. имеют кристаллиты, размеры которых колеблются в широком диапазоне. Средний размер кристаллитов в материале определяет многие физико-технические свойства углеродных материалов. Рентгенографические методы позволяют определить значение этого параметра в углеродных материалах. Однако численные значения средних размеров кристаллитов получаемыми разными рентгеноструктурными методиками различны. Расхождения в результатах получаемых разными методами, по-видимому, обусловлены тем, что дифракционные максимумы углеродных материалов асимметричны, а основное допущение стандартных методик – то, что уширение дифракционных линий должно быть симметричным. Могут быть, две основные причины асимметрии: многофазность образца или непостоянство межслоевых расстояний в кристаллах различного размера. В углеродных материалах экспериментально фиксируются зависимости межслоевых расстояний от размеров кристаллов, это и является причиной асимметрии. Поэтому необходимо разработать модификацию стандартных методик с учетом этой особенности строения углеродных материалов.

Для апробации методик рентгеноструктурного анализа, необходимы образцы с известными размерами кристаллов. Однако синтезировать такие образцы не представляется возможным, так же как затруднительно достаточно точно определить средние размеры кристаллитов и в готовых углеродных материалах другими методами. Поэтому в данной работе теоретически рассчитывались дифракционные максимумы гипотетических образцов с различными средними размерами кристаллитов и различными распределениями кристаллитов по размерам.

Дифракционные максимумы рассчитывали для трех типов распределений: (А) все кристаллы одного размера N ; (В) размеры кристаллов находятся в диапазоне от 0 до $2N$; вероятность найти кристаллы разного размера линейно увеличивается с ростом размеров кристаллов до N , а за симметрично уменьшается; (С) размеры кристаллов находятся в диапазоне от 0 до $2N$; вероятность найти кристаллы разного размера вычислялась из нормального распределения с $\sigma=0.5N$, максимум распределения соответствует N .

При расчетах изменялось N , в результате получались различные дифракционные максимумы, по которым вычислялись размеры областей когерентного рассеяния (ОКР) и микродеформации (МД) методами: метод четвертого момента, метод аппроксимации, методом гармонического анализа и по интегральной ширине линий. Количество элементарных ячеек N изменялось в диапазоне от 30 до 700 (с шагом 10). Профили дифракционных линий задавались по точкам в интервале углов дифракции для линии (002) от 19,82 до 33,35, с шагом $0,023^\circ$, для линии (004) от 47,37 до 62,20 с шагом $0,0247^\circ$. Значение межплоскостного расстояния d_{002}

принимали равным 0,3354 нм, все расчеты проводились для длины волны $\text{Cu } k_\alpha$ рентгеновского излучения с $\lambda=0,154$ нм. Положение максимумов рассчитанных дифракционных линий соответствовало углам дифракции $2\theta=26,546^\circ$ и $2\theta=54,665^\circ$ (для линии 002 и 004 соответственно).

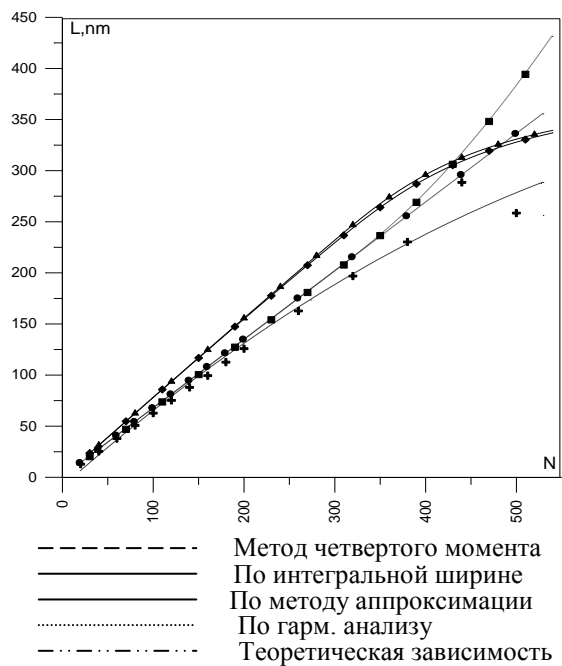


Рис. 1

При сравнительном анализе разных методик в применении к трем типам распределений (А, В, С) кристаллов, было выявлено, что ход зависимости средних размеров ОКР от количества изначально заданных элементарных ячеек N всеми методиками для всех исследованных типов распределений отражается верно. Но есть расхождения в абсолютных значениях по сравнению с теоретически заданными. Расчет МД для каждого исследованного типа распределения получается отличным от нуля, не смотря на то что максимумы моделировали для гипотетических образцов с нулевыми МД. Наиболее близкие к теоретическим значениям данные были получены методом гармонического анализа и методом аппроксимации.

Таким образом, установлено, если целью исследования является выявление качественного хода зависимости средних размеров ОКР, то для определения параметров можно использовать любой из методов, подвергнутых сравнительному анализу. Однако при необходимости определения абсолютных значений средних размеров ОКР и МД, наиболее пригодными является метод гармонического анализа и метод аппроксимации, а менее пригодным следует признать

метод четвертого момента. Причем для корректного определения средних размеров кристаллитов необходимо введение поправочных коэффициенты, зависящих от типа распределения и средних размеров кристаллитов.

Развитие методики послойного анализа поверхности на основе спектроскопии отраженных электронов

Лукашевский Михаил Владимирович

Московский Энергетический Институт (ТУ)

Афанасьев Виктор Петрович, д.ф.-м.н.

lukashevsky-m@yandex.ru

Целью работы является представление метода послойного анализа твердых тел сложного состава, базирующегося на измерении энергетических спектров электронов, отраженных в данный элемент телесного угла. В отличие от Оже-спектроскопии и спектроскопии характеристических потерь энергии, которые используют ту же элементную экспериментальную базу, представляемый метод требует для восстановления элементного и послойного состава мишени измерения спектра в интервале $E_0 \leq E \leq 0,7E_0$, где E_0 – энергия зонда. Для получения подобных спектров используется стандартная экспериментальная база, Оже-спектроскопии и электронной микроскопии [1, 2]. Элементная база экспериментального стенда должна обязательно включать: вакуумную камеру, электронный инжектор и энергоанализатор.

Получение количественной информации об исследуемой мишени является результатом решения обратной задачи для уравнения переноса. Эта задача относится к некорректным и, в нашем случае, для решения используется метод подбора. В настоящее время процесс обработки экспериментальных спектров, обладая, с одной стороны, высокой эффективностью и точностью, с другой стороны, требует высокой квалификации исследователя для реализации метод подбора. Будем считать, что при экспериментальном исследовании мишени, мы располагаем достаточно большой априорной информацией. Например, известны материалы многослойной структуры и порядок толщин слоев. Экспериментальный поиск будет тем более эффективен, если исследователь будет располагать априорной информацией об энергетическом спектре исследуемой мишени, отклонения расчетного и экспериментального спектра будут указывать на необходимость корректировки состава и геометрических размеров мишени. В работе энергетические спектры исследуются на основе аналитических подходов и методов имитационного моделирования рассеяния электронов в веществе в приближении парных соударений.

Создана программа для расчета энергетических спектров электронов, отраженных от многослойных структур, позволяющая работать с широким набором параметров зондирующего пучка и различными

конфигурациями мишени. В работе приводятся примеры работы полученного пакета программ для обработки экспериментальных результатов.

Список публикаций:

- [1]. Черепин В.Т., Васильев М.А. *Методы и приборы для анализа поверхности материалов*. – Киев: Наукова думка, 1982. – 399 с.
- [2]. Rau E., Hoffmeister H., Sennov R., Kohl H. *Comparison of experimental and Monte Carlo simulated BSE spectra of multilayered structures and “in-depth” measurements in a SEM* // *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 2002, V. 35, P. 1433–1437.

Макроскопические деформационные скачки и акустическая эмиссия в ходе ползучести меди

Макаров Сергей Викторович

Алтайский Государственный Университет

Плотников Владимир Александрович, д.ф.-м.н.

plotnikov@phys.dcn-asu.ru

Исследованы закономерности акустической эмиссии и пластической деформации в процессах ползучести поликристаллической меди технической чистоты. Эксперименты представляли собой термоциклирование (нагрев и последующее охлаждение до комнатных температур с умеренными скоростями) медных образцов при механическом нагружении, то есть был реализован неизотермический вариант термического воздействия. Неизотермический вариант термического воздействия позволял за один эксперимент проанализировать деформационные характеристики во всем температурном диапазоне.

Эксперименты показали, что в ходе термических циклов в условиях нагружения при механических напряжениях меньше предела текучести наблюдается монотонное накопление деформации в широком интервале температур включая и интервал вблизи температуры плавления. Монотонный характер накопления деформации коррелирует с монотонным характером акустической эмиссии, то есть рост деформации сопровождается возрастанием среднеквадратического напряжения акустической эмиссии.

Как известно ползучесть - термически активируемый процесс, где скорость накопления пластической деформации подчиняется аррениусовской зависимости. Эта зависимость предполагает, что структурный элемент преодолевает препятствие (потенциальный барьер) в результате совместного действия приложенного напряжения и термических флуктуаций. Можно выделить следующие элементарные процессы, происходящие при ползучести и участвующие в процессе деформации: диффузия вакансий; движение дислокаций (скольжение, переползание); перемещение границ (проскальзывание, миграция). Большая часть деформации при ползучести обусловлена движением большого числа дислокаций в одной системе скольжения, которые при выходе на поверхность формируют следы скольжения. В процессе ползучести дислокационная структура эволюционирует. Дислокации формируют полигонизованную субструктуру, стенки субблоков рассыпаются и включаются в деформацию за счет скольжения (консервативного, атермического движения) и переползания дислокаций (неконсервативного движения).

При напряжениях равных пределу текучести в области высоких температур проявляется немонотонный характер деформации в виде аномально макроскопических деформационных скачков, которые коррелируют с высокоамплитудными акустическими сигналами. Немонотонное накопление деформации не подчиняется аррениусовской зависимости и свидетельствует об атермичности протекающих процессов. Формирование акустического сигнала большой амплитуды свидетельствует о корреляции процесса накопления деформации, результатом которого является акустический максимум. Деформационным скачкам и акустическим сигналам большой амплитуды соответствует скоррелированное движение дислокаций в плоскости скольжения (атермическое скольжение дислокаций) и выход их на свободную поверхность. Амплитуда акустического сигнала может служить степенью корреляции движения дислокаций.

Скачкообразный характер высокотемпературной деформации проявляется как своеобразный периодический процесс в виде повторяющихся монотонных и немонотонных участков накопления деформации. При этом с увеличением номера цикла (соответственно нагрузки) соотношение между приростом монотонной и немонотонной деформации изменяется. Так если в начале циклирования прирост деформации осуществляется за счет монотонной составляющей, то в циклах, с нагрузкой приблизительно равной пределу текучести, накопление деформации происходит за счет скачкообразной деформации. То есть с ростом цикла накопление деформации идет за счет атермических процессов (скольжения дислокаций), в то время как термическая составляющая деформации, уменьшается.

Теплопроводность кристаллов гадолиний-галлиевого граната, легированного ионами иттербия, в интервале температур 50-300 К

Малашенко Артем Викторович

Попов Павел Аркадьевич, Иванов Игорь Анатольевич
Брянский Государственный Университет

Попов Павел Аркадьевич, к.ф.-м.н.

tfbgubry@rol.ru

В настоящей работе абсолютным стационарным методом продольного теплового потока [1] в интервале 50-300 К измерена теплопроводность монокристаллов гадолиний-галлиевого граната (GGG), легированных ионами иттербия (GGG:Yb). Кристаллы выращены методом Чохральского в НИИМВ (г. Зеленоград). Погрешность определения теплопроводности не превышала 5 %, воспроизводимость результатов была не хуже 3 %. Результаты измерения представлены графически на рисунке (рис. 1) в сравнении с данными для номинально чистого GGG [1] (кривая 4) и иттербий-галлиевого граната YbGG [2] (кривая 5).

Эффект снижения теплопроводности в сравнении с нелегированным GGG оказался не вполне очевидным. Для образца с наименьшим количеством добавки ($7,7 \cdot 10^{20}$ ат/см³) в области T=50 К снижение κ составило 14 %, что не намного больше, чем при T=300 К - 6%. Объяснением этого может служить отклонение от стехиометричности состава нелегированного кристалла GGG ($Gd_{3,035}Ga_{4,965}O_{12}$), имеющего в октаэдрической подрешетке сверхстехиометричные ионы Gd^{3+} , замещающие более легкие ионы Ga^{3+} . Для двух других образцов, содержащих примесь в количестве $1,6 \cdot 10^{21}$ и $2,5 \cdot 10^{21}$ ат/см³, также не замечено существенного снижения степени температурной зависимости теплопроводности. Можно сделать вывод о сравнительно малой эффективности ионов Yb^{3+} в кристалле GGG как центров фононного рассеяния. Их влияние на теплопроводность GGG проявляется в основном через изменение параметра кристаллической решетки и, следовательно, изменение скорости распространения фононов. В области комнатной температуры наблюдается линейная зависимость величины теплопроводности от количества легирующей добавки (рис. 2).

№	Состав	Параметр решетки, Å	κ при T=300 К, Вт/(м К)
1	$Gd_{2,858}Yb_{0,182}Ga_{4,96}O_{12}$	12,377	8,0
2	$Gd_{2,652}Yb_{0,388}Ga_{4,96}O_{12}$	12,371	7,3
3	$Gd_{2,432}Yb_{0,608}Ga_{4,96}O_{12}$	12,364	6,7

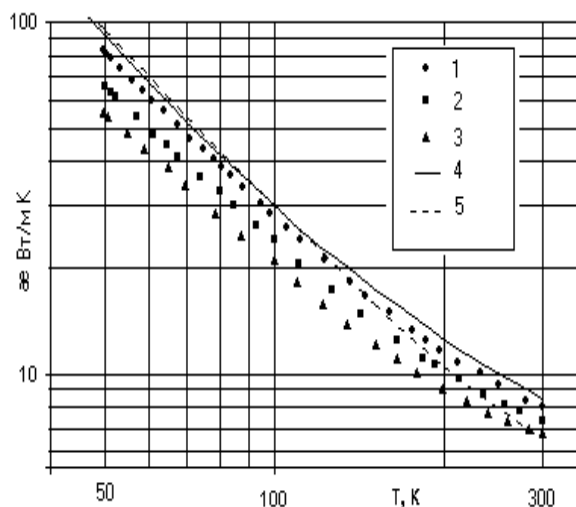


рис 1.

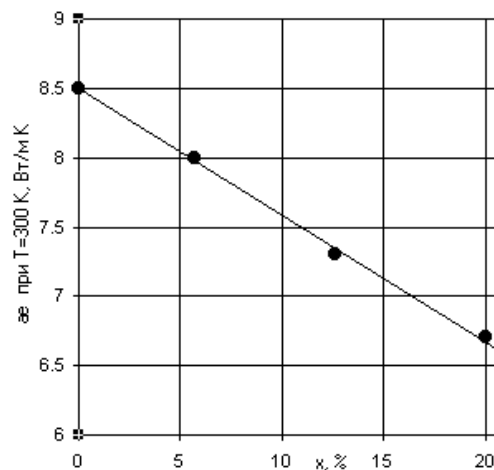


рис 2.

Список публикаций:

- [1] N. N. Sirota, P. A. Popov, I. A. Ivanov. *Cryst. Res. Technol.*, **27**, 535-543 (1992).
[2] G.A. Slack, D.W. Oliver *Phys. Rev. B*, **4**, 592-609 (1971)

Фотостимулированная электронная эмиссия и точечные дефекты в наноструктурных диоксидах кремния и германия

Митрохин Алексей Александрович

Чудинов Александр Андреевич, Бирюков Дмитрий Юрьевич

Уральский Государственный Технический Университет (УПИ)

Зацепин Анатолий Федорович, Кортов Всеволод Семенович

mitrohin@dpt.ustu.ru

Диоксиды кремния и германия играют важную роль в оптике, волноводной технике, микро- и нанoeлектронике. Функциональные характеристики элементов различных устройств на основе SiO_2 и GeO_2 существенно зависят от присутствия в их структуре точечных дефектов, чувствительных к воздействию оптического излучения. Поскольку диоксид кремния и диоксид германия являются ближайшими структурными аналогами [1], то можно ожидать, что собственные дефекты в этих материалах будут иметь близкие характеристики. Эффективным средством исследования природы, энергетической структуры собственных дефектов в поверхностных слоях твердых тел и электронных процессов, протекающих с их участием, является метод фотостимулированной электронной эмиссии (ФСЭЭ). Основной задачей настоящей работы явилось исследование фоточувствительных эмиссионно-активных дефектов в наноструктурных SiO_2 и GeO_2 .

В работе исследовались аморфные нанопористые образцы диоксида кремния, изготовленные путем пиролиза органических соединений. Образцы нанокерамического диоксида германия были изготовлены путем прессования и спекания нанопорошка GeO_2 . Для создания радиационных дефектов образцы облучались быстрыми электронами (10 МэВ) на микротроне М-20 флюенсом $1.6 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$ либо рентгеном (10 мА, 30 кВ, 3 мин.). Измерение спектров фотостимулированной электронной эмиссии производились в вакууме 10^{-4} Па с помощью специализированной экспериментальной установки с детектором электронов ВЭУ-6 при возбуждении ФСЭЭ светом дейтериевой лампы ДДС-30 через монохроматор ДМР-4.

На рисунке 1 показаны спектры ФСЭЭ наведенных радиационных дефектов наноструктурного SiO_2 и нанокерамического GeO_2 . В спектрах наноструктурного SiO_2 (рис. 1 а) обнаружены полосы, характерные для кислородно-дефицитных центров семейства E' , как поверхностного $E'_s(2)$ (6.1 эВ), так и объемного типа: E'_2 (5.35 эВ), E'_1 (5.8 эВ), а также полосу, обусловленную диамагнитными кислородно-дефицитными центрами B_2 (5.0 эВ). Измерения ФСЭЭ нанокерамического GeO_2 (рис. 1 б) также позволили обнаружить аналогичные центры B_2 (5.12 эВ), E'_2 (5.31 эВ), E'_1 (5.64 эВ), $E'_s(2)$ (5.93 эВ), полосы большей части которых по сравнению с SiO_2 сдвинуты в низкоэнергетическую область. Наряду с этим, в GeO_2 наблюдаются так же полосы, приписываемые поверхностным $E'_s(1)$ - (6.13 эВ) и $E'_s(3)$ -центрам (4.82 эВ). Для всех зарегистрированных в SiO_2 и GeO_2 эмиссионных центров определены такие спектроскопические параметры как положение максимумов, полуширины и интенсивности полос.

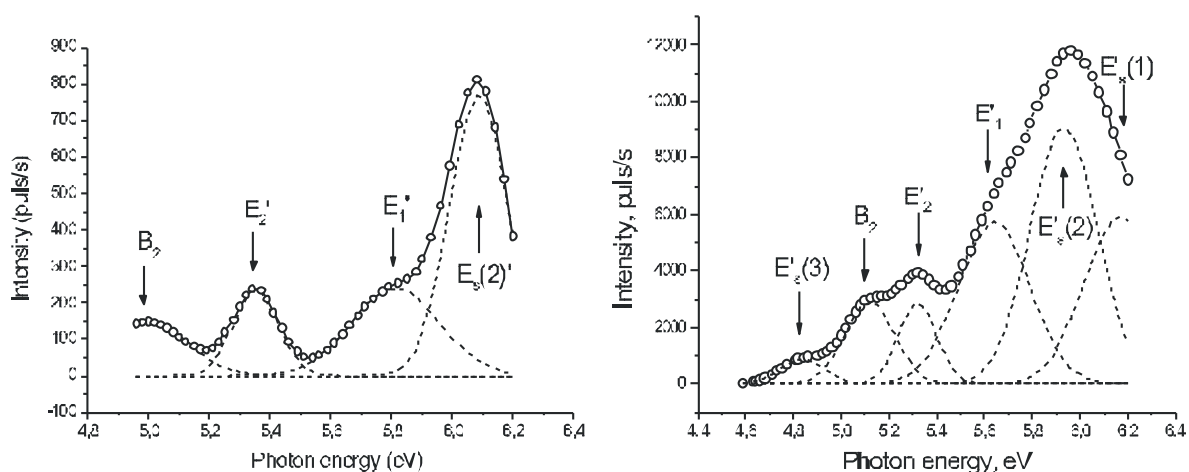


рис.1 Спектры ФСЭЭ

- a) наноструктурного SiO_2 , облученного рентгеном;
- b) нанокерамического GeO_2 , облученного электронами.

Сравнивая интенсивности полос ФСЭЭ в исследуемых материалах, нетрудно заметить, что концентрация поверхностных дефектов $E'_s(2)$ значительно выше, чем концентрация их объемных аналогов E'_2 , что обусловлено высокоразвитой поверхностью в наноструктурных материалах. Кроме того необходимо отметить, что кислородно-дефицитные центры B_2 , регистрируемые также в спектрах фотолюминесценции [2,3],

отличаются не самой высокой эмиссионной активностью. Это может быть объяснено реализацией нескольких параллельных каналов релаксации указанных дефектов. В тоже время не люминесцирующие дефекты семейства E' в эмиссионных спектрах доминируют. Таким образом, можно заключить, что метод ФСЭЭ является одним из наиболее информативных и достоверных для регистрации E'-центров, в особенности для их поверхностных аналогов.

Список публикаций:

- [1]. Okundo M., Yiu C.D., Morikawa H. et al., *J. Non-Crystalline Solids*. V.87, P.312 (1986)
- [2]. Чудинов А.А., Бирюков Д.Ю., Пустоваров В.А. ВНКСФ-10, ч1, с.640 (2004)
- [3]. Trukhin A.N., *J. Non-Crystalline Solids*. V.189, P.291 (1995)
- [4]. Мутрохин А.А., Бирюков Д.Ю., Пустоваров В.А. ВНКСФ-10, ч2, с.1195(2004)

Исследование топографии центров чувствительности и центров вуали на поверхности микрокристаллов AgBr

Морозова Татьяна Владимировна

Трунов Иван Петрович, Владимирова Наталья Валерьевна

Кемеровский Государственный Университет

Колесников Лев Васильевич, профессор, д.ф.-м.н.

natasha-g@list.ru

В работе методом электронной микроскопии были исследованы особенности образования частиц серебра на поверхности примитивных эмульсионных микрокристаллов (МК) AgBr кубической (100) октаэдрической (111) формы в условиях низкой и высокой освещенности. Известно, что скорость проявления МК зависит от природы проявляемых центров и максимальна для центров скрытого изображения по сравнению с центрами вуали, при условии низкого уровня вуали. Исходя из этого, можно утверждать, что мелкие частицы при низком уровне освещения формируются при проявлении центров вуали, соответственно крупные – из центров чувствительности, трансформированных в центры скрытого изображения в процессе засветки. Это позволяет утверждать, что видимые частицы серебра должны быть связаны с центрами чувствительности. В связи с этим можно ожидать, что при более высоком уровне освещения будут выявляться и менее активные центры, связанные как с центрами чувствительности, так и с центрами вуали. Общее их число будет характеризовать предельное число центров на поверхности МК, способных к формированию частиц серебра любой природы. Для исследования брались МК AgBr кубической и октаэдрической формы, синтезированные методом контролируемой двухструйной кристаллизации без добавления тиосульфата и стабилизаторов. Для выявления наиболее активных центров на поверхности МК AgBr проводилось проявление кристаллов предварительно освобожденных от желатины.

При длительном фотолизе примитивных МК AgBr (100) рассеянным светом (низкая освещенность), концентрирование серебра происходило только на некоторых МК, и, как правило, наблюдалось формирование всего одной частицы.

После фотолиза образцов низкой освещенностью и осуществлении их темнового проявления, наблюдалось образование частиц, имеющих нитевидную форму. Центры проявления в данном случае локализованы на углах микрокристаллов. Возможно, образование частиц проявленного серебра связано с центрами вуали, которые могли образоваться в процессе приготовления эмульсии.

Проявив без предварительной засветки образцы, образование серебряных частиц наблюдалось не только на ребрах и углах кристаллов, но и на гранях МК. При этом видно, что скорость проявления отдельных центров, заметно отличается. На поверхности МК можно видеть как мелкие частицы размером до 10 нм, так и более крупные – размером до 100 нм, а в отдельных случаях наблюдалось образование нитевидных выбросов серебра. Известно, что проявление центров СИ происходит значительно быстрее, чем центров вуали. В связи с этим крупные частицы можно связать с наиболее активными центрами на поверхности, где может формироваться СИ, а более мелкие частицы - с вуалью проявления.

При интенсивной засветке (высокая освещенность) с последующим проявлением на поверхности МК AgBr (100) наблюдалось увеличение числа проявленных частиц Ag без изменения их размера и области образования.

При засветке МК AgBr октаэдрической формы с последующим проявлением на поверхности МК формируется более 10^{10} см^{-2} проявляемых серебряных центров. Число проявляемых частиц, полученное в работе близко к значению плотности поверхностных состояний МК AgBr связанных с дефектами поверхности типа "kink". Образующиеся в результате засветки центры СИ декорируют грань (111), причем их образование происходит преимущественно на некотором расстоянии от границ грани.

В зависимости от размеров МК AgBr (100) наблюдалось изменение количества образующихся частиц Ag. Это можно связать с различием в ионной проводимости МК разного размера. Известно, что с уменьшением

размеров ионная проводимость МК (100) увеличивается. Увеличение ионной проводимости связано с увеличением концентрации междоузельных ионов серебра в приповерхностной области МК. Можно предположить, что их повышенная концентрация приводит к конкуренции за захват фотоэлектрона, снижая эффективность концентрирования серебра.

По итогам работы можно сделать следующие выводы: 1. при засветке МК AgBr (ВО) число проявленных частиц увеличивается по сравнению с числом частиц, образовавшихся на поверхности МК при проявлении без предварительной засветки; 2. топография и число центров концентрирования серебра на поверхности МК AgBr кубического габитуса зависит от размера кристаллов; 3. при засветке МК AgBr (НО) проявленные частицы практически не наблюдаются.

Эквивалентная температура облучения графита ячеек СУЗ реактора с графитовым замедлителем

Нестеров Владимир Николаевич

Уваров Дмитрий Сергеевич, Юрченко Андрей Николаевич

Томский Политехнический Университет

Шаманин Игорь Владимирович, д.ф.-м.н.

nesterov@phtd.tpu.ru

Анализ современного состояния графитовой кладки реакторов типа АДЭ показывает, что среднее значение набранного флюенса на внутренней поверхности графитового блока ячеек системы управления и защиты (СУЗ), как правило, в три раза ниже среднего по активной зоне (АЗ) значения флюенса. В диапазоне температуры облучения 100÷300°C в графите присутствуют межузлия и вакансии, они и определяют изменения параметров кристаллической решетки и соответствующих свойств графита. В этом диапазоне уменьшение температуры облучения и плотности потока γ -излучения, благодаря снижению термического и радиационного γ -отжига, приводят к увеличению концентрации дефектов и, как следствие, к уменьшению критического флюенса нейтронов.

В этой связи в работе была поставлена цель: разработать методику расчета и определить распределение эквивалентной температуры облучения по радиусу графитового блока в центральной ячейке СУЗ.

Объемная плотность энерговыделения в каждой точке определяется соотношением:

$$q_v(r) = E_n \xi \Sigma_s \Phi_\sigma(r) \Delta, \quad (1)$$

где E_n – средняя энергия быстрых нейтронов; ξ – средняя логарифмическая потеря энергии; Σ_s – макроскопическое сечение рассеяния нейтронов для энергии нейтронов E_n ; $\Phi_\sigma(r)$ – плотность потока быстрых нейтронов, определенная по методике [1]; Δ – параметр, характеризующий отношение суммарного энерговыделения (за счет замедления нейтронов и рассеяния γ -квантов) к энерговыделению только за счет замедления нейтронов.

Определение тепловыделения за счет γ -квантов в графитовом блоке проводилось по методике [2]. Отличием является то, что ячейка СУЗ разделяется на две зоны: 1 – гомогенизированный технологический канал СУЗ; 2 – графитовый блок.

Было определено, что энерговыделение в графите (в случае извлеченного стержня) составляет: $Q_n \approx 12$ кВт – за счет замедления нейтронов; $Q_\gamma \approx 5$ кВт – за счет рассеяния γ -квантов. Относительно малое значение энерговыделения за счет γ -квантов можно объяснить тем, что в этом случае в ячейке СУЗ нет материалов, которые образовали бы достаточно большое количество высокоэнергетических γ -квантов при поглощении тепловых нейтронов. Таким образом, значение коэффициента $\Delta \approx 1,4$.

Для определения значения энерговыделения в колонне СУЗ со стержнем за счет γ -квантов необходимо учитывать, что плотность потока тепловых нейтронов в стержне СУЗ определяется соотношением:

$$\Phi_m^{СУЗ} = \frac{\Sigma_a^0 (R_\sigma^2 - R_{СУЗ}^2)}{\theta \Sigma_a^{СУЗ} R_{СУЗ}^2} \Phi_m^0, \quad (2)$$

где $\Sigma_a^{СУЗ}$ и $\Phi_m^{СУЗ}$ – средние по стержню СУЗ значения макроскопического сечения поглощения тепловых нейтронов и плотности потока тепловых нейтронов, соответственно; Σ_a^0 и Φ_m^0 – средние по ячейке, за вычетом стержня СУЗ, значения макроскопического сечения поглощения тепловых нейтронов и плотности потока тепловых нейтронов; R_σ и $R_{СУЗ}$ – эквивалентный радиус ячейки и радиус стержня СУЗ, соответственно.

Значение коэффициента θ , характеризующего отношение скоростей поглощения нейтронов в стержне СУЗ и во всей ячейке, определяется из соотношения [3]:

$$\theta = \frac{2}{\chi^2 R_3^2} \left[0,116 - \ln(\chi R_{СУЗ}^{\text{эф}}) \right]^{-1}, \quad (3)$$

где $\chi = \pi / H_{\text{эф}}$ – геометрический параметр, где $H_{\text{эф}}$ – эффективная высота АЗ; $R_{СУЗ}^{\text{эф}}$ – эффективный радиус стержня СУЗ.

Было определено, что значение энерговыделения в графите за счет замедления нейтронов изменяется менее, чем на 1 %, а $Q_\gamma \approx 16$ кВт. Таким образом, значение коэффициента $\Delta \approx 2,33$.

Расчеты показали, что существенного различия в распределениях плотности потока быстрых нейтронов для графитового блока ячейки СУЗ в обоих случаях (со стержнем и без стержня) нет. Основное различие – это изменение энерговыделения за счет γ -квантов от 5 до 16 кВт, поэтому расчет можно вести в рамках одной методики [4] с использованием соотношения (1). В результате расчетов были получены распределения эквивалентной температуры облучения по радиусу графитового блока.

Список публикаций:

- [1]. Нестеров В.Н., Уваров Д.С., Шаманин И.В. и др. "Определение ресурса реакторного графита по параметрам эксплуатации уран-графитового реактора" / Молодежь ЯТЦ: Наука и производство. Материалы конференции. – Томск: Изд-во Том. ун-та, 2004. – С.82-84.
- [2]. Тепловыделение в ядерном реакторе/ Е.С. Глушков, В.Е. Демин, Н.Н. Пономарев-Степной, А.А. Хрулев; Под ред. Н.Н. Пономарева-Степного. – М.: Энергоатомиздат, 1985. – 160 с.
- [3]. Основы теории и методы расчета ядерных энергетических реакторов: Учеб. пособие для вузов / Г.Г. Бартоломей, Г.А. Бать, В.Д. Байбаков и др. – 2-е изд. – М.: Энергоатомиздат, 1989. – 512 с.
- [4]. Крамеров А.Я., Шевелев Я.В. Инженерные расчеты ядерных реакторов. – 2-е изд. М.: Энергоатомиздат, 1984. – 736 с.

Исследование локального окружения активных центров никелиевых комплексов металлохелатов

Ольховая Юлия Андреевна

Власенко Валерий Григорьевич

Ростовский Государственный Университет

Яловега Галина Эдуардовна к.ф.-м.н.

yalovega@ctsnet.ru

В основе строения полимеров а так же молекулярных кристаллов и биологических молекул лежат металлические комплексы. Определение структуры металлокомплексов играет ключевую роль в развитии координационной химии. Для контролируемого синтеза полимерных материалов необходимо установление взаимосвязей характеристик электронного спектра и тонких деталей локальной геометрии активных центров различных металлосодержащих комплексов.

Рентгеновская кристаллография дает полную структурную информацию об атомном строении координационных соединений. Однако, во многих случаях рентгеновская кристаллография не может быть использована. Некоторые образцы не могут давать кристаллы необходимого для дифракции качества (особенно это касается полимеров). Существует широкий класс металлокомплексных полимеров, не обладающих дальним порядком. Зачастую представляет интерес структура комплексов в различных растворах. Во всех этих случаях метод рентгеновской спектроскопии поглощения может предоставить уникальную структурную информацию, так как позволяет исследовать атомную структуру вещества в любом агрегатном состоянии.

Нами было исследовано локальное окружение металлохелата с никелем в активном центре. Были проведен теоретический анализ рентгеновских спектров поглощения за К- краем никеля. Для сопоставления с экспериментом были рассчитаны теоретические спектры поглощения для различных моделей комплексов с никелем в активном центре. Наилучшее согласие с экспериментом было получено для модели, в которой атом никеля имеет октаэдрическое окружение из 2-х атомов серы, 2-х атомов кислорода и 2-х атомов азота (рис.1).

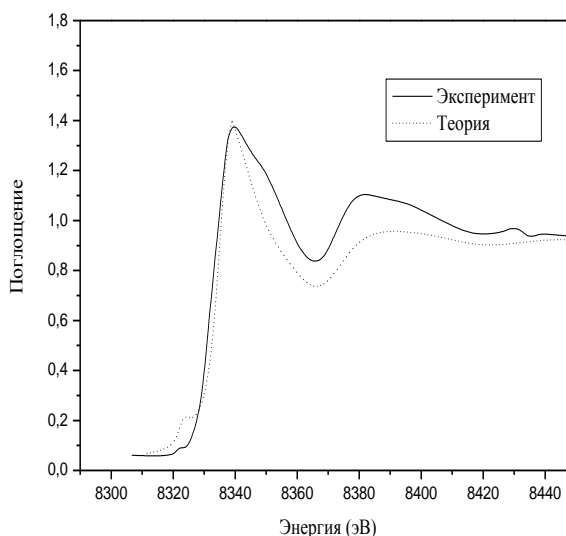
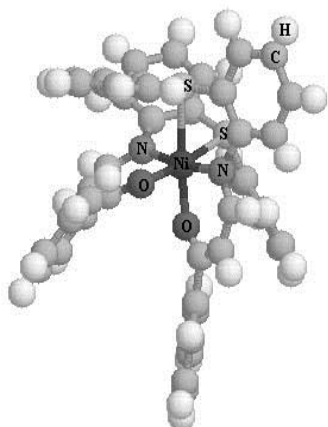


рис.1

Было установлено, что хорошее соответствие эксперимента и теории получается для модели представленной на рисунке, но с расстояниями Ni-S, Ni-O, Ni-N увеличенными на 10% относительно расстояний соответствующих этой модели по результатам рентгеноструктурных данных. Наблюдалось чувствительность рентгеновского спектра поглощения к размеру кластера.

Масштабные факторы физико-химических процессов в реагирующей порошковой среде

Орлов Сергей Александрович
 Томский Государственный Университет
 Дмитриева Мария Александровна
orlov@ff.tsu.ru

Ударный синтез материалов является перспективным направлением развития технологий порошковой металлургии, позволяя реализовывать условия формирования наноструктур при определенных условиях нагружения. В свою очередь образование наноструктур определяет условия и режимы протекания механохимических процессов, поэтому исследование размерных эффектов является актуальной задачей [1].

Моделирование механохимических процессов ударного синтеза включает моделирование процессов ударной модификации порошкового материала, тепло- и массопереноса в реагирующем слое и химических превращений [3, 4]. Моделирование физико-химических процессов в порошковой смеси при ударном воздействии основано на модели реагирующей порошковой среды [5]. Рассматривается порошковый компакт из смеси реагирующих компонентов и инертного наполнителя предварительно спрессованный до заданного значения средней плотности. В модели реагирующей порошковой смеси учитывается наличие макроскопической структуры концентрационной неоднородности. Реагирующая порошковая смесь представляется набором элементов макроскопической структуры концентрационной неоднородности. Реакционная ячейка представляется в форме параллелепипеда с размерами $a \cdot a \cdot b$. В исходном порошковом компакте материал частиц одного сорта считается однородным и изотропным с заданными физическими свойствами для монолитных материалов. Полагается, что для порошков с размером частиц 5 мкм в процессе реакции возможно образование наноструктур и свойства частиц могут меняться в зависимости от размера частиц [6, 7].

Проведена серия вычислительных экспериментов для порошковой смеси Ni-Al стехиометричной для образования моноалюминида никеля. Рассматриваются случаи с двумя размерами порошковых частиц: 5 мкм и 50 мкм. Порошковый слой толщиной $2b$ нагружается плоским ударным импульсом амплитудой 2 ГПа и длительностью 1,0 мкс. Начальная температура слоя $T_0 = 293$ К. Предполагается, что порошковый компакт предварительно спрессован до достижения удельного объема пор P_0 . Рассмотрены случаи со средней пористостью $P_0 = 0,2, 0,3, 0,4$, дисперсией распределения концентраций $D_0 = 3,5 \cdot 10^{-5}, 1,7 \cdot 10^{-2}, 5,1 \cdot 10^{-2}$. Размер представительного объема для порошка со средним размером частиц 5 мкм - $0,003^3$ м³, а для порошка со средним размером частиц 50 мкм - $0,03^3$ м³.

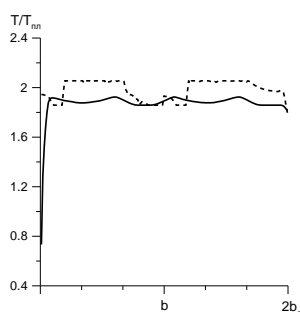


рис.1.

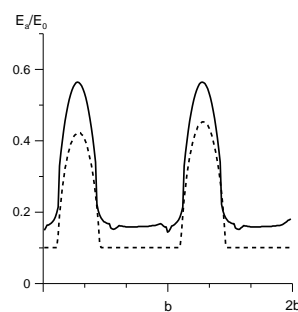


рис.2

На рис. 1 представлено распределение относительной температуры по реагирующему слою $\Pi = 0,4$; $D_0 = 3,5 \cdot 10^{-5}$ в момент окончания химических превращений. Здесь $T_{пл}$ — температура плавления легкоплавкого компонента. Сплошная линия показывает температуру в порошковом слое с размером частиц 5 мкм, а пунктирная — с размером 50 мкм. Характерно, что реакции в ультрадисперсных порошках, способных к образованию наноструктур протекают при более низких температурах, чем в порошках с крупными частицами. Низкая температура при протекании реакции является барьером на пути рекристаллизации, обеспечивая возможность образования наноструктур. В областях, где реакция в порошках с размером частиц 50 мкм идет в режиме теплового взрыва температура значительно выше, чем в ультрадисперсных порошках с размером частиц 5 мкм, где реализуются сверхбыстрые превращения и реакция идет в режиме послойного горения.

На рис. 2 представлено распределение относительной энергии активации порошков $D_0 = 5,1 \cdot 10^{-2}$, $\Pi = 0,4$ в момент времени 7 мкс с момента начала ударного воздействия. E_0 — энергия активации исходных порошковых смесей. Для ультрадисперсных порошков энергия активации в конечный момент времени значительно выше энергии активации крупнозернистых порошков. Порошки, способные к образованию наноструктур в меньшей степени способны к механоактивации, чем крупнозернистые. В свою очередь были выявлены зависимости скоростей механохимических процессов для разных размеров частиц. Реакции в порошках с размером частиц 5 мкм в режиме сверхбыстрых превращений протекают значительно быстрее, чем процессы в крупнозернистых порошках

В результате проведенной серии вычислительных экспериментов сделаны следующие выводы:

1) Основной вклад в повышение реакционной способности порошковой среды оказывает параметр, определяющий размер частиц и толщину реагирующего слоя. Незначительное изменение размера частиц повлечет более сильное изменение реакционной способности, нежели изменение свойств реагентов такого же порядка малости.

2) Процессы образования композита на основе Ni-Al-NiAl в порошках с мелкими частицами протекают при более низких температурах, что обеспечивает возможность образования наноструктур.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Министерства образования РФ и CRDF в рамках программы BRNE (проект № 016-02), гранта Президента РФ №МК-599.2004.8 и российско-американской программы «Фундаментальные исследования и высшее образование» (проект 2004 Post-Doctoral Fellowship Supplemental Awards Award Number T0-016-02, Annex Number BF4M16, Proposal # Y2-P-16-05).

Список публикаций:

- [1]. Орлов С.А. // *Материалы всероссийской научной конференции молодых ученых «Наука. Технологии. Инновации 2004»* ч.1, С. 123-124, Новосибирск, 2004.
- [2]. Валиев Р.З. Александров И.В. *Наноструктурные материалы, полученные интенсивной пластической деформацией* // М. 2000.
- [3]. Скрипняк В.А., Лейцин В.Н., Дмитриева М.А. *Моделирование процессов ударного синтеза алюминидов* // *Хим. Физика*, 2002, № 8, т. 21. С. 14-18.
- [4]. Лейцин В.Н., Дмитриева М.А. *Моделирование процессов ударной модификации реагирующих порошковых материалов* // *Физическая мезомеханика*, 2002, № 4, т. 5. С. 55-65.
- [5]. Лейцин В.Н. *Модель реагирующей порошковой среды* // *Вестник ТГУ. Бюллетень оперативной научной информации*, 2001, №5.
- [6]. Гольдштик М.А. *Процессы переноса в зернистом слое.* — Новосибирск: Институт теплофизики СО АН СССР, 1984. — 164 с.
- [7]. Гусев А.И., Ремпель А.А. *Нанокристаллические материалы.* — М.: Физматлит, 2000. — 222 с.

Процессы самоорганизации при лазерном воздействии на композиционные материалы

Петерсон Михаил Владимирович

Кузьменко Наталья Александровна

Хабаровский Государственный Технический Университет

Кузьменко Александр Павлович, д.ф.-м.н.

Kap@mail.khstu.ru

С помощью лазерного излучения (непрерывный CO_2 – лазер с мощностью до 1.2 кВт) в стационарном режиме получены и исследованы наплавочные покрытия на металлах из композиционных материалов, представляющих смесь стандартных порошков для наплавки с тугоплавкими добавками из боридов (WB_2 и ZrB_2), синтезированных методами порошковой металлургии из обогащенных минералов: шеелита и бадделеита (ИМ ДВО РАН). Известно, что воздействие лазерного излучения создает высокие температурные градиенты, как на узко локализованных участках поверхностей, так и по глубине материалов. Из полученных данных установлено, что образование микроструктур в наплавленных слоях существенным образом зависит от химических и структурных составляющих исходных ингредиентов. Из описания протекающих в этих условиях физических процессов, получены распределения температурных полей, оценены времена протекания реакций. Также как и в работах других авторов, экспериментально наблюдалось формирование волнообразной структуры в наплаваемых покрытиях [1-2]. Для объяснения физической природы их образования были проведены микрорентгеноспектральные исследования концентрационного распределения химических элементов в поперечных шлифах, изготовленных из образцов с наплавочными валиками. На модельных образцах с наплавкой обнаружено, что элементы **Cr**, **Ni** проникают на глубину до 370 мкм.

Согласно концентрационным профилограммам в распределении **Cr** и **Ni** по глубине отмечается периодичность чередования в распределении **Cr** и **Ni** (с периодом порядка 10 мкм), а также противофазность их распределений с учетом условий взаимной растворимости. Удельное количество **Ni** на наибольшей глубине проникновения почти в 2 раза выше, а непосредственно в зоне наплавки концентрация железа уменьшается на порядок. Полученные данные согласуются с результатами по исследованию кинетики процесса лазерного разрушения, представленными в [1], когда также наблюдается волнообразное структурообразование (при лазерном оплавлении **Pb** и **Ti**).

Все эти данные указывают на то, что пространственный период волнообразных структур при лазерном оплавлении изменяется как $\Delta \sim V\mu$, где μ – атомный вес, то есть имеет место термокапиллярный эффект при формировании покрытий. Волнообразные структуры в наплавочном валике являются, по сути, замороженными волнами кристаллизации, и имеют микрокристаллическую структуру. Параметры волнообразных структур определяются внутренними свойствами формируемых поверхностных слоев, с учетом дополнительных вкладов от выделяемой в процессе плавления скрытой теплоты, а также нелинейных изменений теплофизических и оптических коэффициентов. В процессе кристаллизации, сопровождаемой локальным понижением температуры, коэффициенты диффузии (10^{-8} м²/с) и температуропроводности (10^{-7} м²/с) могут сближаться по порядку величины, что способствует более равномерному распределению элементов и однородности структуры покрытия. Помимо этого в металлографических исследованиях наплавочных валиков обнаружено формирование инокулирующих структур, отличающихся макроскопическими размерами (до сотен мкм). Их формирование может быть обусловлено конвекционным перемешиванием, на которое в основном влияет поверхностное натяжение расплава. С ростом температуры коэффициент поверхностного натяжения (σ) уменьшается. В результате цилиндрическая поверхность наплавочного валика возрастает. Увеличение размеров валика сопровождается ростом поверхностной энергии ($E = \sigma S$). Подводимая в зону плавления энергия лазерного излучения, в режиме стационарной наплавки поддерживаемая постоянной, из-за конкурентного действия двух описанных механизмов (термокапиллярного и конвекционного) оказывается промодулированной. На это указывает чередование инокулирующих и волнообразных структур. В этой связи, процесс формообразования наплавочных валиков при лазерном воздействии, может быть отнесен к явлениям самоорганизации, так как в данной динамической системе имеют место сильная диссипация энергии, а также нелинейные изменения параметров.

Модельные представления о волнообразных структурах можно построить из уравнения автоколебательных процессов. Управляющим параметром можно принять изменения коэффициента поверхностного натяжения, а пространственным размером – периодические волнообразные структуры – $L(t)$. Тогда на фазовой плоскости из уравнения $d^2L(t)/dt^2 + \sin L(t) = 0$ может быть получена волнообразная структура, имеющая аналогию с опытно наблюдаемой. При этом режим стационарной наплавки соответствует равновесным состояниям в координатах с точками $(0, \pm 2\pi, \pm 4\pi, \dots)$, тогда, так называемые, седловые точки с координатами $(\pm\pi, \pm 3\pi, \dots)$ соответствуют неустойчивости, когда происходит локальная кристаллизация, сопровождаемая понижением температуры и изменением поверхностной энергии. Адекватность данной модели можно проверить из следующих физических соображений. Скорость распространения волны плавления не может превышать скорость звука для данного материала. Величина этой скорости может быть оценена из наклона $L(t)$ при $t = 0$. Тогда время, соответствующее подкасательной должно совпадать с результирующим

временем релаксации, которые комплексно учитывает все возможные релаксационные механизмы (электрон-электронный, электрон-фононный и фонон-фононный).

С учетом этого опытно определенная величина L , изменяемая в пределах 50-500 мкм, соответствует времени релаксации $\tau = 10^{-6}$ с, что качественно согласуется с полученными данными [1-2]. Эта величина времени, очевидно, соответствует временному параметру самоорганизации в процессе лазерной наплавки.

Список публикаций:

[1] Багаев С.Н., Прокошев В.Г., Кучерик А.О. и др. ДАН, 395(2), 183 – 185 (2004).

[2] Кузьменко А.П., Жуков Е.А., Кузьменко Н.А. и др. Сб. докл. 4-ой Межд. конф. «Оборудование и технологии термического обработки металлов и сплавов», Украина, Харьков: Изд-во ННЦ ХФТИ, 2, 148 – 151 (2003).

Развитие методов исследования материалов и биологических объектов на станции «МЕДИАНА» Курчатовского источника синхротронного излучения

Погорелый Дмитрий Константинович

Подурец Константин Михайлович, Манушкин Алексей Анатольевич

Соменков Виктор Александрович, Щетинкин Сергей Александрович

РНЦ «Курчатовский Институт»

pogodi@kcsr.kiae.ru

Недавно вошел в строй Курчатовский источник синхротронного излучения (СИ) – первый в России специализированный источник, предназначенный для исследований в области рентгеновского излучения с энергией до 30-40 кэВ. Одной из станций, создаваемых на этом источнике, является станция «Медиана», предназначенная для развития рефракционной и фазоконтрастной интроскопии как методов диагностики для медицины и материаловедения.

Метод рефракционной интроскопии состоит в следующем. Рентгеновские лучи, проходящие через объект со сложным строением, преломляются на границах раздела фаз, причем для мягких биологических тканей средние углы отклонения составляют доли угловых секунд. При использовании рентгенооптической схемы с угловым разрешением на уровне долей угловой секунды преломление лучей в объекте оказывает существенное влияние на формирование изображения объекта прошедшим через него пучком. Такой рентгенооптической схемой является двухкристальный спектрометр на совершенных кристаллах, в котором первый кристалл формирует коллимированный пучок, а второй кристалл является угловым анализатором.

Поскольку пучок СИ имеет вертикальный размер несколько миллиметров, для получения большого поля зрения целесообразно использование ассиметричной дифракции на первом кристалле (монокроматоре) и симметричной на втором (анализаторе). В описанных экспериментах были использованы две пары кристаллов кремния. В описанных экспериментах измерения проводились при следующих энергиях рентгеновского излучения: 17 кэВ, 27 кэВ и 40 кэВ. Для регистрации изображений использовали детектор на базе ПЗС-матрицы с полем зрения 3х3 см и разрешением 30 мкм.

Эксперименты проводились с объектами нескольких типов. Во-первых, это простейшие демонстрационные объекты, во-вторых объекты, моделирующие объекты медицинской диагностики, в-третьих небольшие животные, в-четвертых образцы алюминиевого сплава со сварным швом. На всех изображениях наблюдается возрастание контраста по сравнению с абсорбционными изображениями. По-видимому, одним из наиболее перспективных направлений медицинского применения рефракционной радиографии на СИ является маммография. Было проведено исследование маммографического фантома на стандартном маммографе и с помощью рефракционной интроскопии. Проведенные эксперименты показали, что использование рефракционного метода значительно повышает чувствительность маммографического исследования и позволяет обнаруживать такие объекты, как микрокальцинаты, кальцинированные сосуды и опухоли, в несколько раз меньшего размера, чем при стандартной (абсорбционной) съемке. Показано, что достигнутые пространственное и угловое разрешения достаточны для исследования биологических объектов.

Кроме того, на станции «Медиана» создана установка для дифрактометрии микрообразцов, в том числе и микрообразцов под давлением. Для этого разработана и создана схема фокусировки пучка СИ путем последовательной дифракции в горизонтальной плоскости сначала на кристалле, установленном в брегговской геометрии, затем на кристалле в геометрии Лауэ. Изображение детектировалось с помощью пластин ImagePlate.

Также на станции «Медиана» возможно проведение экспериментов по топографии, то есть изучение кристаллических структур (например, выявление дефектов).

Исследование возможности формирования структуры металлофуллерита Fe_xC_{60} в системах Fe-C и Fe- $C_{60/70}$

Поздеева Мария Александровна

Никонова Роза Музафаровна, Кузьминых Евгений Васильевич, Ильясова Алия Исмагиловна

Удмуртский Государственный Университет

Никонова Роза Музафаровна, к.т.н.

MarusiaP@yandex.ru

Наноразмерные материалы являются одним из самых быстроразвивающихся и востребованных направлений современной науки. Особое строение и свойства наноматериалов представляют значительный научный интерес, так как являются промежуточными в цепочке атом-кластер-кристалл. Относительно недавно открытая форма углерода – фуллерены – представляют собой полые внутри кластеры, замкнутая форма которых образована правильными многогранниками из атомов углерода. Особое место среди указанных кластеров занимают кластеры из 60 и 70 атомов углерода – C_{60} и C_{70} .

Фуллерены, а также их производные, являются перспективными нанообъектами для создания новых материалов с различными свойствами – полупроводников, сегнеэлектроников, сверхпроводников, и др. Для материаловедов большой интерес представляет синтез фуллеренов и их соединений в структуре железоуглеродистых сплавов, а также в структуре других металлов.

Следует отметить, что такой важный вопрос как термостабильность фуллеренов/фуллеритов, как самостоятельной фазы, так и особенности ее термического взаимодействия с металлами группы железа также остается до конца не выясненным. Существуют различные данные их стабильности - от 400 до 4000 °С. Исследование термостабильности фуллеренов/фуллеритов необходимо, главным образом, для разработки технологии введения в высокотемпературные расплавы фуллеренсодержащих модификаторов.

Основной целью настоящей работы является исследование термостабильности, а также возможности формирования структуры металлофуллерита Fe_xC_{60} в системах Fe-C и Fe- $C_{60/70}$.

Методами нанометаллургии нами получены фуллеренсодержащие сплавы систем Fe-C с различным содержанием графита и фуллеритов $C_{60/70}$ (0,1; 0,5; 2,0; 5,0%). Кроме того, методом порошковой металлургии получены образцы Fe-2%С, Fe-5%С в форме таблеток. В настоящее время идет комплексное исследование полученных образцов, в том числе с использованием методов рентгеноструктурного анализа, металлографии, ИК-спектроскопии, микрокротвердости и др.

Сравнительные металлографические исследования показали некоторое отличие макро- и микроструктур, сплавов, легированных фуллеритами и графитом. В процессе травления шлифов выявилась большая разница в травимости – время травления шлифа, легированного фуллеренами в несколько раз превышает время травления образца, легированного графитом, при этом выявляются и различия в макроструктуре. В сплавах Fe-2%С и Fe-2% C_{60} особых отличий в микроструктуре нет, однако при легировании фуллеренами наблюдается более мелкозернистая структура.

Анализ образцов Fe-C и Fe- C_{60} показал, что микроструктура обоих образцов представлена перлитом (феррит+цементит), цементитом, ледебуритом (перлит+цементит) и иглами вторичного цементита. Особых отличий между образцами не наблюдается. Данные РСА подтверждают результаты металлографии.

В образце, сплавленном из порошков железа и фуллерита при $T=1210^{\circ}C$ с применением защиты из титановой губки, наблюдалось всплытие углеродной составляющей на поверхность слитка. Дальнейший рентгено-структурный анализ показал, что данная фаза, скорее всего, является мелкокристаллическим фуллеритом. При изготовлении аналогичного образца, но с полной защитой от кислорода (Ti губка) порошки спеклись в небольшие, по размеру гранулы. На основании чего можно предположить, что фуллерит, без доступа кислорода, повышает температуру плавления железа.

Особенности C-V-характеристик структур на основе твердого раствора $InGaN$

Потанахина Любовь Николаевна

Глушко Виктор Олегович

Ульяновский Государственный Университет

Грушко Наталья Сергеевна, д.ф.-м.н.

Kapiton04@yandex.ru

Исследовались гетероструктуры на основе твердого раствора $InGaN$. Целью работы является определение профиля распределения легирующей примеси и контактной разности потенциалов.

Профили легирующей примеси для исследуемых образцов рассчитывались из вольт-фарадных характеристик (ВФХ) по [1] и имели особенности в виде минимумов на возрастающем градиенте легирующей

примеси. Наличие минимумов на профиле легирующей примеси может свидетельствовать о ее частичной компенсации.

На ВФХ исследуемых образцов наблюдалось уменьшение емкости структуры при напряжениях $U > 3V$. Зависимость $1/C^3 = f(U)$ имеет несколько линейных участков, поэтому надо учитывать постоянную емкость для образца №1. Для определения контактной разности потенциалов рассматриваем образец как последовательное соединение, включенных навстречу друг другу диодов.

С учетом эквивалентной схемы составляем уравнения, используя значение полной емкости эквивалентной схемы при $U=0$ и значение общего напряжения при $1/C^3 = f(U) = 0$, предполагая, что все напряжение падает на диоде, смещенном в обратном направлении. Систему уравнений решаем относительно переменных $x = \sqrt[3]{U_{k1}}/\alpha_1$, $y = \sqrt[3]{U_{k2}}/\alpha_2$ ($\alpha_{1,2}^3 = 3/qa_{1,2}\epsilon_0^2\epsilon^2S^3$, где q – заряд электрона, S – площадь p - n -перехода, $\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-14} \text{ Ф/см}$, $\epsilon = 12,2$, $a_{1,2}$ – градиент концентрации, определяемый по полученным профилям легирующей примеси) Считаем, что закрыт диод с меньшим градиентом концентрации, а следовательно, с большим α . При решении системы уравнений получаем квадратное уравнение относительно x (y), положительные корни которого имеют вид

$$x = \frac{-3\left(\frac{2}{C} - \frac{1}{C(0)}\right)}{6} + \frac{C(0)\sqrt{\frac{9}{C^2(0)}\left(\frac{2}{C} - \frac{1}{C(0)}\right)^2 - \frac{12}{C(0)}\left(\frac{3}{C(0)C^2} - \frac{3}{C^2(0)C} + \frac{1}{C^3(0)} - \frac{U}{\alpha_2}\right)}}{6} \quad (1) \text{ для образца №1}$$

$$x = \frac{\frac{3}{C(0)} + \sqrt{\frac{12C(0)U}{\alpha_2^3} - \frac{3}{C(0)^2}}}{6} \quad (2) \text{ для образца №10}$$

Для образца №1 учитывалась также зависимость $\left(\frac{1}{C_{\text{экс}}} - \frac{1}{C_{\text{const}}}\right)^3 = f(U)$ (3), которая

аппроксимировалась прямой, и по методике, предложенной в [1] находились $U_{k1,2}$.

Контактную разность потенциалов определяем, используя уравнение Пуассона. На профиле легирующей примеси выделялись участки линейной зависимости концентрации примеси от координаты, которые аппроксимировались прямыми. При этом считалось, что каждый из участков создает плотность зарядов: один – акцепторную, другой – донорную. За ноль принималась точка перехода одного распределения примеси в другое. Интегрируя уравнение Пуассона при граничных условиях $\varphi(-x_p) = 0$, $\varphi(x_n) = -U_k$, находим распределение потенциала $\varphi(x)$.

Напряженность и потенциал электрического поля непрерывны на протяжении всей области пространственного заряда (ОПЗ), поэтому при $x=0$ получаем:

$$x_p \left(b_1' - \frac{a_1}{2} x_p \right) = x_n \left(\frac{a_2}{2} x_n + b_2' \right) \quad (4)$$

$$U_k = \frac{q}{\epsilon\epsilon_0} \left(x_p^2 \left(\frac{a_1}{3} x_p - \frac{b_1'}{2} \right) - x_n^2 \left(\frac{a_2}{3} x_n + \frac{b_2'}{2} \right) \right) \quad (5).$$

Для определения x_p, x_n используем значение ширины ОПЗ, которое определяется как $W = x_p + x_n = \epsilon\epsilon_0 S / C(0)$ (6). Находим из (6) x_n как $x_n = f(W, x_p)$ и подставляем в (4), получаем квадратное уравнение относительно x_p , решая которое находим выражение для определения x_p :

Если использовать стандартные формулы резкого p - n -перехода, тогда $U_k = q(b_1 x_p^2 + b_2 x_n^2) / 2\epsilon\epsilon_0$ (7).

Предложенные способы расчета контактной разности потенциала дают значения, совпадающие в пределах погрешности. Однако каждый из способов имеет свои недостатки: сложность при расчете U_k по (1), (2) связана с определением площади, приходящейся на каждый диод, при расчете по (5) с тем, что при аппроксимации профиля примеси не учитываются его особенности, а при расчете по (7) – с точным определением вида p - n -перехода (резкий или плавный), что в нашем случае достаточно затруднительно. Совместное использование нескольких способов расчета U_k позволяет согласовывать полученные результаты.

Список публикаций:

[1]. Берман Л.С. Ёмкостные методы исследования полупроводников. Л.: Наука, 1972.

Подвижность и время жизни в структурах на основе твердого раствора $InGaN$

Потанахина Любовь Николаевна

Глушко Виктор Олегович

Ульяновский Государственный Университет

Глушко Наталья Сергеевна, д.ф.-м.н.

Kapiton04@yandex.ru

Нитридные гетероструктуры применяются в оптоэлектронике (светодиоды, инжекционные лазеры, фотоприемники), на их основе созданы мощные высокочастотные полевые транзисторы, работающие при высоких температурах. В этих структурах достигаются большие значения подвижности носителей заряда, от которой зависит быстродействие прибора. Рассеяние электронов, захваченных в квантовой яме (КЯ), происходит в условиях захвата фононов. Это оказывает влияние на процесс токопереноса в гетероструктуре, а следовательно, и на подвижность носителей заряда.

В данной работе исследовались гетероструктуры на основе твердого раствора $InGaN$ с целью установления характера изменения подвижности и времени жизни носителей заряда при изменении внешних условий (температуры и напряжения прямого смещения).

По C - V -характеристикам определены профили легирующей примеси, которые имели особенности в виде минимумов на возрастающем градиенте. Наличие минимумов на профиле легирующей примеси может свидетельствовать о ее частичной компенсации. Возникающий компенсированный слой приводит к образованию сильного внутреннего электрического поля, которое вызывает разогрев носителей заряда и зависимость подвижности от напряжения смещения.

По температурным зависимостям вольт-амперных характеристик (ВАХ) структуры был определен механизм токопереноса – туннелирование. При этом выполняется закона Мотта, что говорит о наличии прыжковой проводимости. Рассчитана зависимость плотности состояний вблизи уровня Ферми $g(\mu)$ от приложенного напряжения U , на которой можно выделить следующие участки: уменьшения $g(\mu)$ с ростом U , слабого изменения (в минимуме), возрастания.

В полупроводниках ВАХ на участке токов, ограниченных пространственным зарядом, описывается формулой:

$$j = q\mu N_{c(v)} \left(\frac{\varepsilon_s}{qN_t} \right)^m \frac{U^{m+1}}{L^{2m+1}} \quad (1),$$

где μ - подвижность при условии полного заполнения ловушек, L - ширина области пространственного заряда (ОПЗ), $n=m+1$ - наклон ВАХ, аппроксимированной линейным участком, N_t - концентрация ловушек, $N_{c(v)}$ - эффективная плотность состояний в зоне проводимости (валентной зоне), $\varepsilon_s = \varepsilon\varepsilon_0$ (ε - диэлектрическая проницаемость полупроводника, ε_0 - диэлектрическая постоянная).

Подвижность, рассчитанная по (1), для образца №1 резко возрастает в области напряжений $1 - 2B$, переходя при напряжении $U > 2B$ в участок слабого изменения или насыщения. Подвижность образца №10 проходит через участок насыщения в области напряжения $1 - 2B$, при напряжении $U > 2B$ наблюдается слабый рост подвижности при увеличении напряжения на образце. При этом значение подвижности на участке насыщения больше для образца №1.

В исследуемой структуре осуществляется прыжковый механизм переноса с участием туннелирования. Уместен подход «дисперсионного» транспорта. В каждый момент времени процесс переноса осуществляется только делокализованными носителями. Присутствие значительной фракции локализованных носителей существенно влияет на характеристики переноса. В режиме равновесного транспорта многократный захват носителей на локализованные состояния приводит к значительному уменьшению подвижности. Дрейфовая подвижность приобретает температурную зависимость, определяемую видом энергетического распределения локализованных уровней. Кинетические коэффициенты увеличиваются с ростом температуры.

В области малых напряжений (до $2 B$) преобладает подвижность, обусловленная прыжками между локализованными состояниями. Поэтому участок насыщения подвижности может быть связан с участком минимума плотности состояний вблизи уровня Ферми. Независимость $g(\mu)$ от напряжения приводит к тому, что от напряжения не зависит и вероятность прыжка, и среднее расстояние между состояниями, на которые совершается прыжок, а следовательно, подвижность носителей заряда также не зависит от напряжения.

Увеличение подвижности в области напряжения ($U > 2B$) для образца №10 можно объяснить тем, что с ростом напряжения коэффициенты захвата рекомбинационных центров становятся функцией напряженности электрического поля, следовательно, появляется зависимость времени жизни и концентрации свободных носителей от U . За рекомбинацию могут отвечать центры, заряженные одноименно с носителями заряда. В этом случае захватываемый носитель заряда должен преодолеть потенциальный барьер или проникнуть сквозь него

туннельным путем. При этом вероятность захвата быстро возрастает с увеличением его энергии, а следовательно, при увеличении напряжения на образце. Увеличение коэффициентов захвата приводит к увеличению концентрации связанных носителей. При этом дрейфовая подвижность $\mu_D = \mu_0 \frac{n_i}{n_0 + n_i}$ (n_0 – концентрация свободных носителей, n_i – концентрация связанных носителей) возрастает.

Можно предположить, что с изменением напряжения на образце уровень Ферми проходит области с разным уровнем легирования. Т. к. в процессе токопереноса участвуют носители вблизи уровня Ферми, то уменьшение количества ионизированной примеси приводит к уменьшению вероятности рассеяния на ионизированной примеси, а следовательно, к росту подвижности носителей.

Время жизни носителей заряда в ОПЗ рассчитывалось по формуле: $\tau = qSWn_i(\exp(qU/2kT)-1)/I$ (2), где W – ширина ОПЗ, n_i – концентрация собственных носителей, I – ток в структуре.

Зависимость $\tau=f(U)$ возрастает с ростом напряжения U при постоянной температуре. Температурные зависимости времени жизни от напряжения пересекаются при $2,8B$. При малых полях τ растет с ростом температуры, при больших ($U > 2,8B$) уменьшается. У образца №10 при напряжениях больше $2B$ на зависимости $\tau=f(U)$ появляется два наклона, что можно объяснить тем, что при высоких напряжениях в области больших температур увеличивается роль нелокализованных состояний в исследуемых структурах.

Таким образом, в области напряжений до $2,8B$ для образцов №1, 10 преобладает рассеяние на ионизированных примесях (возрастание времени жизни с ростом температуры), при напряжении $2B$, в области высоких температур начинают преобладать механизмы рассеяния на колебаниях решетки, т. к. с ростом температуры увеличивается доля «горячих» носителей заряда. При напряжениях больше $2,8B$ основным механизмом рассеяния становится рассеяние на колебаниях решетки (уменьшение времени жизни с ростом температуры).

Исследование нефтяных дисперсных систем методом диэлектрической спектроскопии

Потанова Светлана Викторовна¹

*Сараев Денис Владимирович², Лунёв Иван Владимирович¹, Юсупова Татьяна Николаевна²,
Романов Геннадий Васильевич²*

¹Казанский Государственный Университет

²Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова

Гусев Юрий Александрович¹ к.ф.-м.н.

Svet_lana1@mail.ru

Многообразие и специфика вопросов, возникающих при исследовании нефтяных дисперсных систем (НДС), аномалии в их поведении приводят к необходимости рассмотрения данных систем на микро и макро уровнях. В свою очередь, различие в свойствах макромолекул (полярные, слабополярные, неполярные) нефтяных систем, что отражается на характере их межмолекулярного взаимодействия, ведет к различию определения подходов анализа их физических свойств. Среди физико-химических методов исследования структуры НДС, эффективными являются методы диэлектрической спектроскопии, позволяющих следить за изменением ориентации дипольных моментов компонентов нефтей.

Целью данной работы являлось применение метода диэлектрической спектроскопии в исследовании особенностей структуры нефтяных дисперсных систем и рассмотрение динамики процессов деструктуризации под воздействием температуры.

Исследования дисперсной структуры нефтяных систем, проводились методом временной диэлектрической спектроскопии (ВДС), в интервале частот 10^4 - 10^9 Гц. в широком температурном диапазоне от 20°C до 105°C . В качестве исследуемых образцов были отобраны высоковязкие нефти Татарстана, различающиеся как в геологическом и возрастном аспектах (девон, карбон), так и в компонентном и микроэлементном составах, где в качестве основных параметров рассматривалось содержание асфальтенов, смол, ванадия и никеля.

Анализируя полученные диэлектрические спектры исследуемых НДС, были выявлены отличительные особенности в динамике релаксационных процессов. Согласно корреляции диэлектрических параметров компонентного и микроэлементного составов НДС, была проведена классификация нефтей на 4 основные группы. Предложены гипотетические модели описывающие поведение данных групп под воздействием температуры. Выявлены интервалы температур с импульсным переходом в областях дисперсий: 36 - 40°C , 40 - 60°C , и выше 70°C , соответствующие фазовым переходам в системе. Рассмотрены два механизма ассоциирования асфальтеновых комплексов с образованием агломератов различной геометрии.

Формирование углеродных частиц на поверхности меди электродуговым осаждением в вакууме

Румянцев Василий Александрович

Рогов Сергей Александрович, Пугачевский Максим Александрович

Хабаровский Государственный Технический Университет

Институт Материаловедения ХНЦ ДВО РАН

Пячин Сергей Анатольевич, к.ф.-м.н.

ammigos@mail.ru

Перспективы и актуальность использования углеродных частиц и плёнок, обладающих алмазоподобной структурой, связаны с уникальными свойствами алмаза: высокой твёрдостью, теплопроводностью, температурным коэффициентом сопротивления; стабильностью электрических и полупроводниковых характеристик и т.д. Имеются работы, в которых установлено, что совместное распыление графита и меди или использование меди в качестве подложки приводит к стабилизации и укрупнению нанокластеров алмаза в углеродной пленке [1,2]. Это обусловлено тем, что кристаллографические параметры меди и алмаза имеют близкие значения. Целью данной работы являлось исследование условий формирования углеродных частиц и тонких плёнок с алмазоподобной кристаллической структурой на поверхности меди.

Распыление углерода осуществляли методами электродугового испарения графита в вакууме остаточным давлением менее 10^{-4} мм.рт.ст. Сила тока дуги составляла 60-70 А. В качестве подложки использовали медную фольгу толщиной около 40 мкм, отполированную и отожженную в вакууме для снятия остаточных напряжений и увеличения размеров кристаллических зерен металла, а также тонкую медную пленку толщиной около 100 нм, осажденную на поверхность кремния. Температуру подложки измеряли с помощью пирометра и термопары. Фазовый состав и микроструктуру формируемых плёнок исследовали с помощью рентгеновского дифрактометра ДРОН-3М и просвечивающего электронного микроскопа УЭМВ-100К.

В результате проведенных исследований было установлено, что фазовый состав полученных углеродных плёнок зависит от температуры медной подложки. Анализ плёнок, формируемых на поверхности меди без ее нагрева, показал, что пленки являются структурно-аморфными. На рентгеновских дифрактограммах и

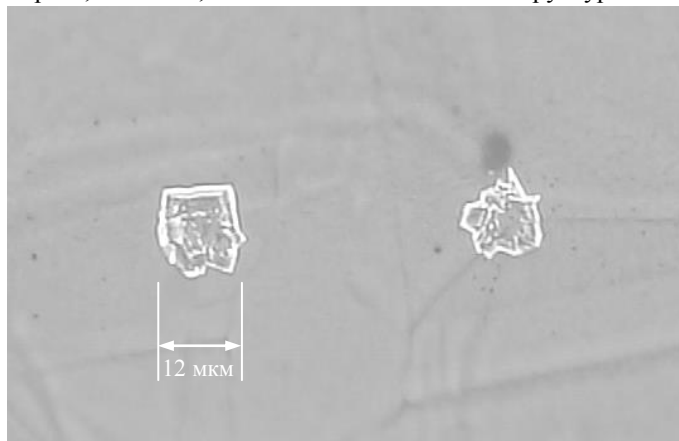


рис.1 Внешний вид углеродных частиц

электроннограммах таких плёнок отсутствуют пики. При повышении температуры медной подложки начиная с 200 °С на рентгенограммах углеродных плёнок помимо линий меди наблюдается линия, соответствующая межплоскостному расстоянию 3,21 Å. Предположительно эта линия принадлежит углероду с кубической решеткой. Электронограмма углеродной пленки, сформированной на фольге при температурах выше 400 °С, представляет собой два широких кольца, максимумы которых близки к межплоскостным расстояниям алмаза – 2,06 и 1,26 Å. Кольца графита не наблюдаются. Таким образом, можно утверждать, что формируемая на меди углеродная пленка имеет алмазоподобную структуру.

В некоторых случаях при электродуговом распылении графита в вакууме на поверхности медной фольги помимо углеродной пленки наблюдались прозрачные кристаллы, в основном, правильной кубической формы (рис.). Кристаллы формируются, как правило, на границах зерен меди. Размеры сторон этих кристаллов и плотность их расположения изменяется в зависимости от температуры подложки. При увеличении температуры медной подложки от 200 до 800 °С, средний диаметр частиц увеличивается от 0,1 до 5 мкм. Исследования методом просвечивающей электронной микроскопии микроструктуры углеродной пленки показали, что она является неоднородной по плотности. Кристаллы не просвечиваются лучом электронным микроскопа, т.е. их толщина составляет величину более 100 нм.

Список публикаций

[1] И.В. Иванов-Омский, С.Г. Ястребов, ФТТ, Т. 41, 10, 1863-1866. (1999)

[2] Q.H. Fan, E. Pereira. Journal of Materials Science, 34, 1353-1365 (1999)

Образование петлевых дислокаций в кремнии вблизи локальных тепловых источников

Рыбин Владислав Витальевич

Скворцов Аркадий Алексеевич

Ульяновский Государственный Университет

Скворцов Аркадий Алексеевич, к.ф.-м.н.

vlad_rib@mail.ru

Работа посвящена изучению дефектообразования в приконтактных областях полупроводника при наличии локального источника тепла на поверхности в виде дорожки металлизации, нагреваемой прямоугольным токовым импульсом.

На основе анализа температурных полей в полупроводниковой пластине, создаваемых токовыми импульсами (плотности тока $j > 5 \cdot 10^{10} \text{ А/м}^2$), проведён расчет термоупругих напряжений в кремниевой подложке. Предсказано и экспериментально обнаружено образование линейных дефектов вблизи источников термоудара (рис.1).

Экспериментальное исследование тепловых режимов осуществлялась на системе Si-Al. В качестве полупроводниковой матрицы использовались кремниевые пластины n-типа (диаметром 76 мм, толщиной 450 мкм и удельным сопротивлением 10 Ом·см) с напылённым алюминиевым слоем толщиной $h_1=1-3$ мкм. Для регистрации температурных изменений в приповерхностных слоях полупроводника на поверхности кремния формировалась тестовая структура, детально описанная в [1]. Через нее пропускались прямоугольные импульсы с регистрацией осциллограмм включения $U(t)$ по методике [1,2]. Выявление дислокационной структуры производилось стандартными методами химического травления с последующим контролем оптической микроскопией.

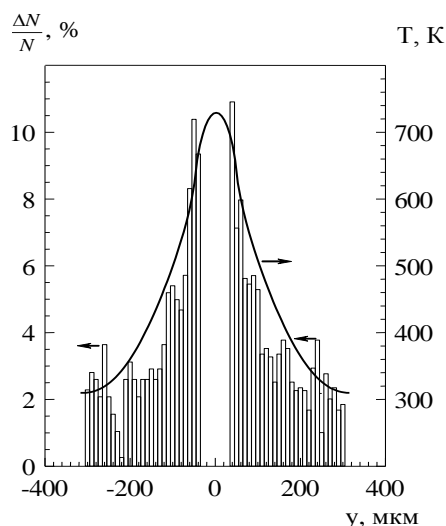


рис.1. Гистограмма распределения дислокаций по длинам пробегов от тестовой структуры после пропуска импульса тока амплитудой $4.8 \cdot 10^{10} \text{ А/м}^2$ ($I=18 \text{ А}$) и длительностью 150 мкс. Сплошная линия – температурный профиль на поверхности полупроводника в момент выключения токового импульса.

По итогам работы можно сделать следующие выводы.

1. Показано, что активная пластификация поверхностных слоев полупроводника вблизи источника термоудара может начинаться при прохождении одиночного токового импульса длительностью $\tau \sim 100$ мкс и амплитудой $j \geq 5 \cdot 10^{10} \text{ А/м}^2$.
2. Экспериментально проанализированы режимы генерации линейных дефектов, обнаружен пороговый характер этого процесса.
3. Выявлено, что наиболее активное дефектообразование соответствует достижению температуры пластического течения кремния и протеканию необратимых деградационных процессов в контактной системе Al-Si.
4. Полученные результаты, позволяют определять область безопасной работы контактных систем.

Список публикаций:

- [1]. Скворцов А.А., Орлов А.М., Саланов А.А. Деградационные процессы в системе алюминий-кремний при импульсных электрических воздействиях. //Письма в ЖТФ. 2001. Т.27. Вып.19. С.76-84.
- [2]. Орлов А.М., Скворцов А.А., Литвиненко О.В. Генерация изгибных колебаний полупроводниковых пластин локальными тепловыми источниками. //ЖТФ. 2003. Т.73. Вып. 6. С.78-81.

Исследования процесса жидкофазного спекания порошковых тел системы Al-Cr

Самсонова Алина Васильевна

Институт физико-технических проблем Севера СО РАН

Винокуров Геннадий Георгиевич, к.т.н.

Tsm1982@mail.ru

Во всем мире и, прежде всего в промышленно развитых странах наблюдается повышенное внимание к порошковой металлургии алюминия и его сплавов. Порошковая технология дает возможность значительно улучшить свойства изделий из алюминия, создать легкие, прочные, коррозионностойкие и хладостойкие материалы.

Целью данной работы является изучение закономерностей объемных изменений при спекании порошковых тел на основе алюминия с добавкой хрома.

Согласно результатам проведенных ранее исследований порошковых систем алюминий-переходной металл (Al-Ni, Al-Ti, Al-Fe, Al-Cu) наибольший научный и практический интерес представляет область концентраций металла – добавки до 15%. С учетом этого исследовались сплавы с содержанием хрома от 2,5 до 15 ат.%. Температура спекания варьировалась от 700 до 970 °С. Для определения влияния марки порошка алюминия в работе применялись порошки марок АСД-1 и ПА-4. Применение порошка марки АСД-1 позволяет получать более плотные брикеты практически на всем диапазоне температур спекания.

Большое влияние на объемные изменения порошковых тел оказывает режим спекания. Выделение большого количества тепла при появлении жидкой фазы и образовании интерметаллидов может вызвать резкие изменения объема прессовки и потерю формы брикета. Сохранение формы является важнейшим требованием для изготовления различных деталей. Выбор оптимального режима спекания позволяет получать готовые изделия заданных размеров.

Для выяснения характера влияния режима термообработки проводили спекание по двум режимам. При спекании по первому режиму производился нагрев до температуры спекания со скоростью 30 °С/мин. При спекании по второму режиму проводили дегазационный отжиг для устранения влияния адсорбированных и находящихся в порах газов при температуре 300 °С в течении 30 мин, затем поднимали температуру печи до 500 °С со скоростью 15 °С/мин и проводили твердофазный отжиг в течении 30 мин, после чего температура печи поднималась до температуры спекания со скоростью 15 °С/мин.

При температуре спекания 700 °С с увеличением содержания добавки прессовки испытывают меньшую усадку, и при содержании хрома 10% и более брикеты испытывают рост. Образцы с содержанием хрома 2,5 и 5% уже при данной температуре претерпевают значительную усадку вследствие малого количества хрома, образующего твердофазный скелет прессовки, и не сохраняют форму. При температуре спекания 800 °С на кривой имеется точка аномально большого роста при содержании 12,5% Cr. При температуре спекания 900 °С с увеличением содержания добавки прессовки испытывают меньшую усадку. Рост наблюдается у образцов с 15%Cr. При температуре 970 ° все образцы кроме образцов с 15% Cr не сохраняют форму.

На следующем этапе работ проведены dilatометрические исследования. Основным достоинством данного метода является возможность исследования изменения линейных размеров образца в ходе спекания, возможность сопоставления температуры брикета с характером его объемных изменений.

Образцы с содержанием хрома 2,5, 5 и 7,5% претерпевают усадку. В начале усадки наблюдается пик, когда происходит кратко временный рост образца, сменяемый дальнейшей усадкой. Наличие этого пика может быть вызвано ростом частиц хрома при преимущественной диффузии атомов алюминия в них. При последующем росте температуры всего образца происходит усадка из-за процесса перегруппировки частиц твердофазного скелета прессовки под воздействием капиллярных сил. Величина усадки при увеличении содержания твердой фазы уменьшается. Температура образца при данной концентрации хрома при возникновении жидкой фазы поднимается выше температуры печи и затем снижается до нее, кроме образца с содержанием 2,5%. При спекании образцов с содержанием хрома 10, 12,5 и 15% наблюдается их рост. При этом пик роста возникает сразу при появлении жидкой фазы, без предварительной усадки. Это свидетельствует о наличии устойчивого твердофазного скелета прессовки. С увеличением температуры образца из-за экзотермической реакции образования интерметаллидов количество жидкой фазы увеличивается, и происходит незначительная перегруппировка частиц, вызывающая кратковременную усадку, сменяемую небольшим ростом с последующей постепенной усадкой у образца с 10%, и ростом у образцов с 12,5 и 15%Cr. Выделение тепла по сравнению с образцами с меньшим содержанием хрома более значительно, и температура образца растет пикообразно.

Кристаллохимические особенности системы Cu-S

Сафонов Александр Николаевич

Матухин Вадим Леонидович, Погорельцев Александр Ильич

Хабибуллин Илдар Хайдарович

Казанский Государственный Энергетический Университет

Матухин Вадим Леонидович, д.ф.-м.н.

alx_rus@mail.ru

В настоящем сообщении приведены результаты спектров ЯКР $\text{Cu}^{63,65}$ в некоторых соединениях системы Cu-S. В настоящее время известно 9 природных соединений системы Cu-S. По составу и физическим свойствам их можно разделить на 2 ряда: халькозин – дигинитовый ($\text{Cu}_2\text{S} - \text{Cu}_{1,75}\text{S}$) и джирит – ковеллиновый ($\text{Cu}_{1,6}\text{S} - \text{CuS}$) [1]. Согласно [2] формула соединения CuS (ковеллин) должна быть представлена в виде $(\text{Cu}^{+})_4 (\text{Cu}^{2+})_2 (\text{S}^{2-})_2 (\text{S}^{2-})_2$; т.е. структура образована двумя разными типами катионов, формула для халькозина может быть записана следующим образом $(\text{Cu}^{+})_{192} (\text{S}^{2-})_{96}$. Спектры этих соединений носят совершенно различный характер: при $T=77^\circ\text{K}$ в ковеллине наблюдается одна линия ЯКР Cu^{63} при частоте 14.75 МГц, в то время, как в халькозине обнаружено 24 линии ЯКР Cu^{63} в диапазоне частот 17.3 – 25.7 МГц. В джирите $\text{Cu}_{1,6}\text{S}$ спектр ЯКР Cu^{63} наблюдается в диапазоне 11-17 МГц – 5 линий.

Таким образом, результаты исследований спектров ЯКР указывают на то, что даже ничтожное отклонение состава сульфидов меди от стехиометрии – сопровождается структурной перестройкой их кристаллической решетки, то есть образованием нового соединения.

Список публикаций:

[1]. Габлина И.Ф. Минералы системы медь-сера. М.: Геоинформак, 1993.

[2]. Ronald J. Goble *The relationship between crystal structure, bonding and cell dimensions in the copper sulfides*// *Canadian Mineralogist*, vol.23, pp.61-76, 1985.

Изучение влияния высокотемпературного отжига на элементный состав нанопористого кремния

Свеженцова Екатерина Витальевна¹

Мельниченко Николай Николаевич²

¹Институт Физики Полупроводников имени В.Е. Лашкарева

²Киевский Национальный Университет имени Тараса Шевченко

katt@univ.kiev.ua

В последние годы интенсивно исследуются поверхностные полупроводниковые наноструктуры благодаря возможности их применения в новых наноразмерных приборах, принципы работы которых основаны на квантовых эффектах. Ярким примером таких наноструктур является нанокристаллический или нанопористый кремний, свойства которого сильно зависят от метода и режимов формирования. Так с целью увеличения фотолюминесцентных (ФЛ) свойств многие исследователи предлагают использовать оптимальные режимы формирования нанокристаллического кремния, обработку наноразмерного слоя различными веществами, быстрое термическое окисление и многое другое. Однако, как известно, на ФЛ свойства нанокристаллического кремния могут также влиять и параметры подложки, тип проводимости полупроводника, кристаллографическая ориентация, состояние поверхности и т.д.

Целью работы являлось изучение влияния высокотемпературного отжига исходных подложек монокристаллического кремния на элементный состав и ФЛ свойства нанокристаллического кремния сформированного на них после отжига.

Отжиг подложек монокристаллического кремния проводился на воздухе в интервале температур 400-1000°C и времени 2-4 ч. При этом толщина формирующейся пленки окисла кремния на поверхности подложек, зависящая от температуры и времени отжига, контролировалась методом Оже-электронной спектроскопии с послойным травлением. Методом химического травления в растворе на основе плавиковой и азотной кислот на отожженных и не отожженных подложках были сформированы пленки нанокристаллического кремния. В работе показано, что предварительный отжиг подложек в интервале температур 400-1000°C приводит к увеличению интенсивности люминесценции для всех образцов нанопористого кремния, нанесенных на отожженные подложки в ~1,5-2 раза. Следует отметить, что максимальное значение интенсивности ФЛ наблюдается для образцов нанокристаллического кремния сформированных на подложках монокристаллического кремния отожженных при температуре $T=1000^\circ\text{C}$.

Детальное изучение морфологии поверхности нанопористого слоя на отожженных и не отожженных подложках методом атомно-силовой микроскопии проведенное в работе [1] указывает на отсутствие существенных отличий в наноструктуре. В связи, с чем в данной работе было проведено изучение элементного состава нанопористого кремния сформированного на отожженных и контрольных подложках методом Оже-

электронной спектроскопии, которое показало, что наблюдается увеличенное содержание SiO_x как на поверхности, так и в глубине нанопористого кремния сформированного на модифицированных отжигом подложках.

Полученные результаты могут быть объяснены с точки зрения структурных изменений, которые происходят при термообработке в поверхностных областях монокристаллического кремния. При этом наблюдается корреляция ФЛ свойств и содержания SiO_x нанокристаллического кремния.

Список публикаций:

[1]. Свеженцова Е.В., Мельниченко Н.Н. Влияние5 модификации поверхности на фотолуминесцентные свойства нанопористого кремния. Сборник тезисов, ВНКФС-10, Москва, 2004г., ст.620,621.

Исследование стабильности механических свойств быстро-затвердевшей фольги сплава АЛ4, легированного Ni и Cr.

Сивцова Полина Александровна

Белорусский Государственный Университет

Шепелевич Василий Григорьевич, д.ф.м.н.

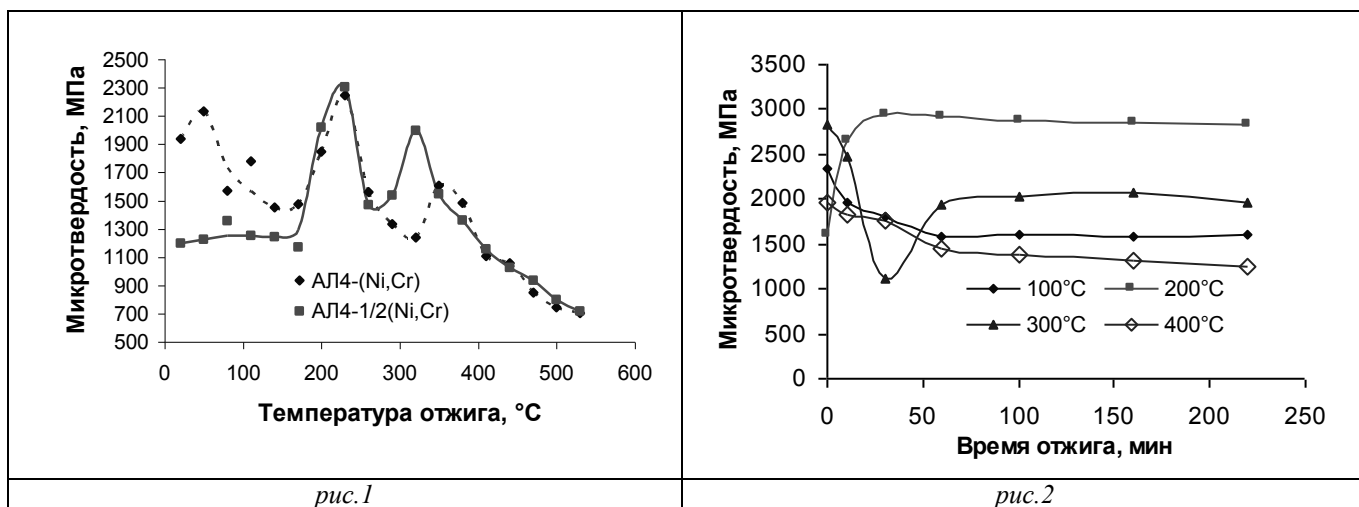
mikhalch@mail.ru

Исследование фольг сплавов системы Al-Ni-Cr, проведенное ранее [1–3], выявило специфическое поведение этих сплавов при старении из быстро-закаленного состояния. Характерные особенности процесса старения получают свое объяснение при учете взаимодействия Ni и Cr в кристаллической решетке алюминия. Улучшение свойств промышленных алюминиевых сплавов путем легирования их Ni и Cr стало задачей нашего исследования после выявления эффективного упрочнения быстро-затвердевших фольг чистого алюминия с добавками этих элементов при старении.

Литейный алюминиевый сплав АЛ4 (0,17...0,3 масс. % Mg, 0,2...0,5 масс. % Mn, 8...10,5 масс. % Si, Al – остальное) был выбран нами в качестве основы для изучаемых сплавов из-за широкого применения в промышленности и эвтектической структуры.

Сплав номинального состава АЛ4 – 0,30 ат. % Cr – 0,90 ат. % Ni был получен сплавлением компонентов в муфельной печи. Данный сплав и АЛ4 использовались для синтеза сплава АЛ4 – 0,15 ат. % Cr – 0,45 ат. % Ni. Для получения фольг сверхбыстрой закалкой из жидкой фазы капля расплава (~0,2 г) инжестировалась на внутреннюю полированную поверхность вращающегося медного цилиндра и кристаллизовалась. Максимальная длина полученных фольг достигает 5 см, их ширина – 10 мм. Толщина исследуемой фольги находилась в пределах 50...100 мкм. Скорость охлаждения достигала 10^6 К/с. Сторона, прилегающая к кристаллизатору, имеет зеркальную, а противоположная сторона – бугристую структуру.

Микротвердость фольг исследовалась с помощью ПМТ-3 с использованием нагрузки 20 г. Изохронный отжиг быстро-затвердевших фольг проводился от комнатной температуры до 530 °С через 30 °С с выдержкой по 20 мин при каждой температуре отжига. Изотермический отжиг проводился в течение нескольких часов при температурах $T=100, 200, 300$ и 400 °С.



Изохронный отжиг исследуемых фольг показывает сложную зависимость микротвердости от температуры нагрева (рис. 1). Наблюдаемые изменения H_u при изохронном отжиге подтверждаются результатами, полученными при изотермическом отжиге (рис. 2). Возрастание микротвердости при изотермическом отжиге выше, чем при изохронном. Установлено, что при изохронном отжиге в фольгах сплавов последовательно происходят следующие структурные изменения:

1. отжиг микронапряжений в интервале 20 – 140 °С,
2. выделение никельсодержащей фазы с последующей коалесценцией выделений в интервале 170 – 260 °С — первый пик на рис. 1,
3. аналогичный процесс для хромсодержащей фазы, протекающий при 290 – 410 °С — второй пик на рис. 1,
4. собирательная рекристаллизация 410 – 530 °С.

Полученные результаты свидетельствуют в пользу предположения о существенном взаимодействии Ni и Cr в кристаллической решетке алюминия, что приводит к выделению никелевой фазы и соответствующему значительному упрочнению сплава.

Список публикаций:

- [1] Сивцова П. А., Шепелевич В. Г. *МАШИНОСТРОЕНИЕ*. Минск: УП “Технопринт”. 2003. Выпуск 19. Сс. 717 – 720.
- [2] Сивцова П. А., Шепелевич В. Г. *Быстрозакаленные материалы и покрытия // Доклады 2-ой Всероссийской научно-технической конференции, 17-18 ноября 2003 г., “МАТИ” – РГТУ им. К. Э. Циолковского.* М.: Издательский центр “МАТИ” – РГТУ им. К. Э. Циолковского. 2003. Сс. 53 – 58.
- [3] Сивцова П. А., Шепелевич В. Г. *Структурные основы модификации материалов методами нетрадиционных технологий (МНТ-VII) Обнинск: ИАТЭ. 2003. Сс.108–109.*

Физико-механические свойства композитов из сосны, полученных без связующих веществ

Скuryдина Елена Михайловна

Алтайский Государственный Технический Университет

Маркин Виктор Борисович, д.т.н.

skur@alt.ru

На протяжении ряда лет на Алтае ведутся экспериментальные исследования в области рациональной утилизации растительных отходов. Количество отходов деревообрабатывающих производств может достигать 50% от объема исходного сырья. Одно из направлений их рациональной утилизации – изготовление композиционных материалов с использованием метода высокотемпературного взрывного автогидролиза без применения связующих веществ на стадии прессования. Следует отметить, что взрывной автогидролиз в настоящее время считается в мире одним из самых экономичных, эффективных и перспективных методов предобработки лигноцеллюлозы для дальнейшей ее переработки в важные лесохимические продукты (спирты, сахара, дрожжи, целлюлозу, и т.п.). Полученные таким способом композиты способны заменить массивную древесину. Но для внедрения разработанного способа получения композиционных плитных материалов в промышленное производство необходимо доказать преимущество их над ДСП по уровню основных показателей.

До настоящего времени в качестве исходного сырья для получения композиционных материалов были использованы разные отходы сельскохозяйственного растениеводства (костра льна, солома злаковых), и один вид древесного сырья – технологическая щепка березы (по ГОСТ 15815). В представляемой работе впервые в качестве исходного материала использовались опилки сосны разных фракций, взятые в неизменном виде из бункера отходов реального лесопильного производства. Массовая доля древесины сосны в отходах ~ 100%, массовая доля частиц коры составляла не более 5%. Максимальный размер древесных частиц в материале не превышал 10×7×1,5 мм³.

Исследовались физико-механические показатели плитных материалов: предел прочности при статическом изгибе, плотность, разбухание и водопоглощение за 24 часа. Данные методы исследования впервые были применены к определению эксплуатационных характеристик композитов из сосны. Исследование предела прочности при статическом изгибе, плотности и гидрофобных свойств проведено в соответствии с ГОСТ 10633, 10634, 10635, 19592 для древесностружечных и древесноволокнистых плит. Взвешивание образцов производилось на аналитических весах, толщина измерялась микрометром в трех-пяти точках. За толщину образца принято среднее арифметическое значение этих измерений.

Результаты эксперимента показали, что композиты, полученные из опилок сосны мелкой фракции, приблизительно на 30% более прочны, чем материалы из щепы березы и на 80% прочнее ДСП, полученной традиционным способом с применением терморезактивных смол. Тем не менее, композит, полученный из более крупных опилок, менее прочен, чем композит из березы и имеет равную прочность с ДСП. Очевидно, что не последнюю роль в различиях играет плотность материалов. Мелкофракционная волокнистая масса обеспечивает более плотную укладку при горячем прессовании, при этом количество конденсированных связей возрастает пропорционально уменьшению размеров прессуемых частиц. Наблюдается прямая зависимость прочностных характеристик от плотности образцов. При этом композиционный материал из щепы березы имеет плотность ниже на 14% при сопоставлении с композитом из опилок сосны мелкой фракции, и на 4% при сопоставлении с композитом из опилок крупных. Ранее, на основании изучения нескольких сотен образцов, была

получена большая статистическая зависимость прочности при изгибе материалов, изготовленных исключительно из щепы березы, от их плотности $\sigma(\rho)$. Оказалось, что для большинства материалов эта зависимость линейна. При анализе зависимости прочности от плотности композитов, изготовленных из опилок сосны, было обнаружено, что она также линейна, но наклон прямой не совпадает с наклоном прямой для материала из березы, и описывается другим линейным законом. Иными словами, зависимость $\sigma(\rho)$ композита из сосны не может быть описана законом, характеризующим аналогичную зависимость для материала из березы.

Обращает на себя внимание различие в гидрофобных свойствах. Разбухание композита из сосны в два с половиной, а водопоглощение в два-четыре раза меньше, чем композита из березы. Разбухание ДСП в 4-6 раз больше, чем композита из сосны.

С помощью использованных методов исследования возможно получение важной информации, необходимой для определения комплекса основных технических характеристик материала:

- композиционный материал, получаемый из опилок сосны, обладает большей плотностью, чем материал из щепы березы и ДСП;
- гидрофобные характеристики материала из сосны существенно выше гидрофобных показателей материала из березы и ДСП;
- прочность при статическом изгибе композита из сосны является функцией дисперсности исходного сырья, и тем выше, чем меньший размер имеют исходные частицы;

Полученные экспериментальные данные показали, что плитные композиционные материалы из отходов сосны обладают приемлемыми физико-механическими характеристиками, в целом не уступающими показателям ранее изготовленных материалов из березы. По важнейшим показателям получаемые материалы не уступают, а в ряде случаев (водостойкость) значительно превышают требования, предъявляемые к стандартным материалам класса «сверхтвердые», изготавливаемым на основе древесины с применением синтетических термореактивных смол.

Влияние одноосной деформации на ИК-спектры карбиноидов

Соколова Мария Николаевна

Маргамов Ирик Гаязович, Евсюков Сергей Евгеньевич

Челябинский Государственный Педагогический Университет

Песин Леонид Абрамович, к.ф.-м.н.

Sokolovamn@rambler.ru

Исследованы две серии образцов карбиноидных пленок, полученных из частично кристаллизованного поливинилиденфторида (ПВДФ) марки KYNAR. Вторая серия отличалась тем, что исходные пленки ПВДФ предварительно подвергались одноосной деформации. Образцы синтезированы в результате дегидрофторирования смеси насыщенного раствора КОН в этаноле с ацетоном в соотношении 1:9 в течение 1, 6 и 24 часов. Реакция проводилась при комнатной температуре. После синтеза образцы промывались в ацетоне и этаноле.

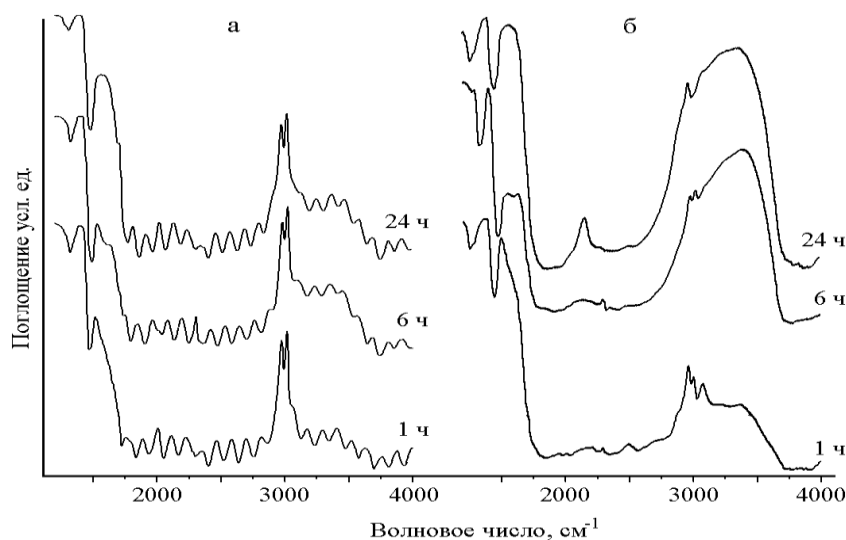


рис.1

Измерения ИК-поглощения проводили с помощью спектрометра Specord 75 IR. Погрешность прибора в определении волновых чисел не превышает $\pm 2 \text{ см}^{-1}$, а интенсивности — 1,5%. На рис. 1 представлены ИК-спектры исследованных образцов, полученные через 10-20 минут после синтеза. Справа от каждого спектра указана продолжительность химического воздействия в часах. Для нормировки по интенсивности в области $2700\text{-}3300 \text{ см}^{-1}$ прописывалась линия νCH исходной пленки ПВДФ.

Сравнивая спектры образцов серий I (рис.1а) и II (рис.1б), можно выделить ряд отличительных особенностей. В ИК-спектрах образцов серии II заметно изменяется соотношение дублетов пика νCH и не наблюдается интерференция ИК-излучения. Последнее может быть обусловлено тем, что нарушается плоскопараллельность сторон при одноосной деформации пленки ПВДФ. Спектры образцов серии II демонстрируют также меньшую концентрацию CH- ($2800\text{-}3150 \text{ см}^{-1}$) и большую C=C- связей и OH- групп ($1450\text{-}1850$ и $3150\text{-}3700 \text{ см}^{-1}$, соответственно). Кроме того, в спектрах этих образцов наблюдаются пики, свидетельствующие о наличии $\text{C}\equiv\text{C-}$ связей ($2100\text{-}2200 \text{ см}^{-1}$) и ароматических комплексов (3100 см^{-1}).

Различие между ИК-спектрами образцов двух серий можно объяснить следующим. Поскольку процесс дегидрофторирования при синтезе идет с двух сторон поверхности пленки и глубина проникновения раствора меньше ее толщины, то карбиноидный образец всегда содержит слой непрореагировавшего ПВДФ, толщина которого будет меньше в случае одноосной деформации. Кроме того, при деформации возможны разрывы цепей ПВДФ, что увеличивает степень аморфности исходного полимера, а значит и глубину проникновения дегидрофторизирующего раствора. Поэтому доля прореагировавшего при синтезе слоя ПВДФ будет больше. Это приводит к тому, что в спектрах образцов серии II лучше видны особенности, характерные для карбиноидов.

Работа выполнена при поддержке регионального гранта РФФИ-Урал 04-02-96052.

О возможности ЭП контроля спая поршневой вставки ДВС

Спирин Николай Сергеевич

Ярославский Государственный Университет

Митрофанов Виктор Анатольевич, к.ф.-м.н.

kolyns@rambler.ru

При существующей технологии изготовления (литье) поршней ДВС (двигателей внутреннего сгорания) на моторных заводах возможны случаи неспая чугунной поршневой вставки (ПВ) для кольца уплотнения с алюминиевым сплавом. После механической обработки заготовки поршня (циркулярное обтачивание и прорезание канавки в ПВ) в месте спая могут возникнуть дополнительные дефекты типа расслоений. Выявление их акустическим методом сопряжено с использованием довольно хрупких пьезопластин, частая поломка которых и неустойчивость приема полезного сигнала в цеховых условиях ставят под сомнение эффективность метода.

Альтернативно нами исследовалась возможность контроля спая ПВ электропотенциальным (ЭП) методом на постоянном токе. Изучались вопросы организации ЭП контроля спая ПВ на двух стадиях обработки поршня: до и после прорезания канавки.

К настоящему времени:

- 1) с помощью компьютерной программы Quick-Field произведено моделирование двумерного электрического поля, возбуждаемого в районе ПВ при различных способах подвода тока к поршню;
- 2) найдены положения потенциальных электродов, при которых чувствительность измеряемого напряжения к неспаю на отдельных участках внутренней границы ПВ должна быть наибольшей;
- 3) изготовлен четырехэлектродный шариковый ЭП преобразователь (датчик) для контроля спая ПВ до проточки канавки, неповреждающий поверхность поршня как при циркулярных, так и продольных перемещениях;
- 4) на фрагменте поршня с непроточенной ПВ (трехмерный объект) установлено, что измеренные с помощью изготовленного датчика величины напряжений неплохо коррелируют с результатами компьютерного моделирования;
- 5) спроектирован датчик, позволяющий выявлять отслоения ПВ после проточки канавки;
- 6) рассмотрены вопросы создания программно-управляемого комплекса для реализации сплошного контроля спая ПВ в условиях производства.

Свойства материалов для чувствительных элементов информационных систем

Столярова Мария Вячеславовна

Аверин Игорь Александрович

Пензенский Государственный Университет

Аверин Игорь Александрович, к.ф.-м.н.

micro@diamond.stup.ac.ru

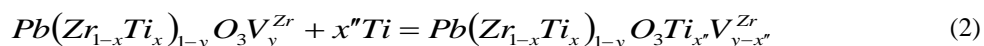
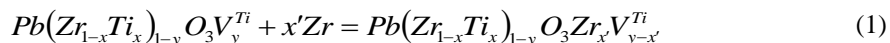
Важное значение для развития микро-, наноэлектроники имеет разработка технологии изготовления материалов с заранее заданными и управляемыми свойствами.

Целью данной работы является разработка физико-химической модели, позволяющей установить взаимосвязь между условиями получения и электрофизическими свойствами различных материалов электронной техники. В качестве объектов исследования служат все классы веществ, а именно, проводники, полупроводники и активные диэлектрики, на примере хромоникелевых сплавов, бинарных соединений и твердых растворов соединений A^4B^6 и сегнетокерамики типа ЦТС соответственно.

В основу разработки модели, положена взаимосвязь между электрофизическими свойствами материалов для чувствительных элементов информационных систем и отклонением состава твердого раствора от стехиометрии. Использование различных условий синтеза при получении материалов приводит к их обогащению одним компонентом и как следствие обеднение другим. Данный процесс можно описать с помощью квазихимических уравнений. Эти уравнения для разных классов веществ имеют сходный характер, заключающийся в образовании вакансий в подрешетке одного из компонентов, причем концентрации вакансий определяет электрофизические свойства материалов, а, следовательно, информационных систем в целом.

Твердые растворы сегнетокерамики с кристаллической решеткой типа перовскита в общем виде обозначается как ABO_3 . В случае твердых растворов сегнетокерамики типа цирконата-титаната свинца (ЦТС), описываемых формулой вида $Pb(Zr_{1-x}Ti_x)O_3$, в качестве компонента A выступает ион свинца Pb^{+2} , B - ион Ti^{+4} и O - ионы кислорода O^{2-} . В зависимости от состава твердого раствора по x , а именно, содержания ионов Ti и Zr , в ЦТС существуют пять различных фаз: две антисегнетоэлектрические и три сегнетоэлектрические, кроме того температура Кюри также определяется содержанием Ti и Zr в твердом растворе и варьирует от 503К до 763К при изменении x от 0 до 1.

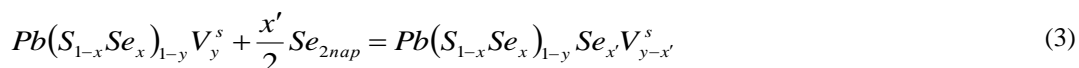
Замещения в процессе синтеза титана цирконием и наоборот можно описать следующими уравнениями:



где V_y^{Ti} и V_y^{Zr} - соответственно концентрация вакансий титана и циркония.

Состав твердого раствора $Pb(Zr_{1-x}Ti_x)O_3$, равный $x=0,47$, соответствует области морфотропного фазового перехода (ОМФП), где в равновесии находятся сегнетоэлектрическая и антисегнетоэлектрические фазы и наблюдаются неординарные пьезоэлектрические и сегнетоэлектрические свойства.

Соединения на основе A^4B^6 являются фазами переменного состава синтез, которых осуществляется в условиях поливариантных равновесий. Информационные системы, где реализуется фоторезистивный эффект, получают в виде поликристаллических пленок. Особый интерес представляют информационные системы на основе р-п-переходов и барьеров Шоттки с использованием твердых растворов соединений A^4B^6 . Диапазон рабочий длин волн таких систем определяется шириной запрещенной зоны, которая также зависит от состава твердого раствора по x . Процесс изменения состава по x твердого раствора $PbS_{1-x}Se_x$ в процессе синтеза за счет варьирования давления пара неметалла можно описать следующим уравнением:



где V_y^s - вакансии в подрешетке серы.

Таким образом, использование избыточных давлений пара селена в процессе синтеза приводит к заполнению вакансий в подрешетке халькогена твердых растворов $PbS_{1-x}Se_x$.

Таким образом, посредством варьирования условиями синтеза можно получать твердые растворы не только с широким диапазоном составов по x , но и с разными типом электропроводности и концентрацией носителей заряда.

Информационные системы, эксплуатируемые при высоких температурах, изготавливают с использованием резистивных пленок, какими являются $Cr_{1-x}Ni_x$. Синтез таких пленок сопряжен с некоторыми трудностями, вызванными различными скоростями испарения атомов хрома и никеля. Уравнение, описывающее синтез пленок хромоникелевых сплавов, имеет вид:

$$(Cr_{1-x}Ni_x)_{1-y}V_y^{Ni} + x'Cr = (Cr_{1-x}Ni_x)_{1-y}Cr_xV_{y-x'}^{Ni}, \quad (4)$$

где V_y^{Ni} - вакансии в подрешетки никеля.

Таким образом, в процессе синтеза происходит обогащение хромоникелевых пленок хромом, приводящее к изменению их свойств.

Следовательно, предложенная физико-химическая модель, позволяет связать электрофизические свойства материалов чувствительных элементов информационных систем с величиной отклонения их состава от стехиометрии.

Сравнительные металлографические исследования структуры и свойств газотермических покрытий из порошковых проволок.

Стручков Николай Федорович

Институт Физико-Технических Проблем Севера СО РАН

Винокуров Геннадий Георгиевич, к.т.н.

struchkov_n@rambler.ru

Важнейшими факторами, определяющими эксплуатационную надежность и срок службы деталей машин, являются свойства обработанных рабочих поверхностей. Увеличение срока службы деталей машин можно обеспечить путем образования на поверхности этих деталей и элементов слоев или покрытий

В зависимости от требуемого покрытия используют порошковые проволоки (далее ПП) различные по составу, наличие которых в проволоке придает покрытию требуемые свойства.

Были изготовлены образцы из ПП, разработанных в ИФТПС и промышленных ПП (НПП «Вега-1», г. Комсомольск-на-Амуре). Проволока перед напылением прокалывалась при температуре 200°С в муфельной печи в течение 2 часов. В качестве подложки использовались образцы для испытания на износостойкость из Ст.3, которые проходили предварительную подготовку дробеструйной обработкой и обезжириванием. Покрытия были получены электродуговой металлизацией на установке ЭДУ-500С.

Технологические режимы нанесения приведены в таблице:

Порошковый материал	Ток, А	Напряжение, В	Дистанция, мм	Толщина, мм
САВ21	220	38	130	0,5-0,7
САВ51	200	38	130	0,5-0,7
САВ40	180	38	130	0,5-0,7
ИФТПС	280	38	130	0,5-0,7

Для сравнительного исследования состава, структуры, свойств были изготовлены поперечные шлифы, на которых проведены металлографические исследования на микроскопе «Neophot-32». Получены цифровые фотографии покрытий из ПП различных составов и технологических режимов электродуговой металлизации. Обработка цифровых изображений для исследования структуры покрытий из ПП проводилась в программной среде MathCad. Как показали исследования, при электродуговой металлизации ПП формирование покрытия происходит наложением расплавленных частиц, состоящих из основной фазы оболочки и порошковой набивки. Тугоплавкие компоненты порошковой основы застывают в виде отдельных нерасплавленных частиц, все покрытия из ПП характеризуются неоднородной структурой. Границы между частицами обозначаются оксидными пленками, пористость невысокая. Исследования показали, что покрытия из ПП разработки ИФТПС, обладают более однородной структурой.

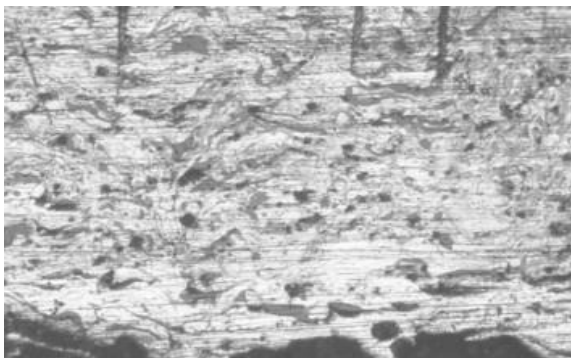


рис. 1. Структура газотермического покрытия из проволоки разработки ИФТПС, 250*

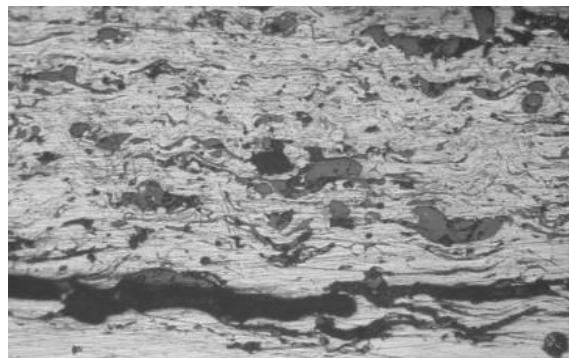


рис. 2. Структура газотермического покрытия из промышленной проволоки САВ-40 разработки НПП Веха-1, 160*

Статистические характеристики структуры алмазometаллических композитов, полученных взрывным прессованием

Суздалдов Илья Петрович

Институт физико-технических проблем Севера СО РАН

Винокуров Геннадий Георгиевич, к.т.н.

iliasuzdalov@mail.ru

В настоящее время алмазные инструменты получили широкое применение во всех отраслях промышленности. Принципиально новые перспективы для создания алмазometаллических композитов открывает использование энергии взрыва. Возможности взрывного прессования связаны с особенностями процессов, протекающих при высоких давлениях, скоростях, температурах, когда в результате практически мгновенного высокоинтенсивного воздействия на порошки происходят их уплотнение, нагрев и деформирование, образуются контакты между частицами. Таким образом, специфика процесса взрывного прессования приводит к тому, что алмазometаллические композиты характеризуются неоднородным и пористым строением. В аналогии с другими порошковыми материалами, полученными высокоэнергетическими методами, форма затвердевших частиц алмазometаллических композитов и поровое пространство между ними определяют структуру, влияющую на важнейшие физико-механические характеристики. Структура алмазometаллических композитов формируется под непрерывным воздействием случайных факторов (распределение частиц по размерам, различная степень нагрева и т.д.). Поэтому для описания структуры алмазometаллических композитов наиболее целесообразным является статистический подход.

Целью данной работы является разработка статистического подхода для описания структуры порошковых материалов, полученных высокоэнергетическими методами и сопоставление расчетных данных с результатами экспериментальных исследований статистических характеристик локальной плотности алмазometаллических композитов.

При построении статистической модели структуры порошковых покрытий и материалов, полученных высокоэнергетическими методами были допущены следующие предположения:

- локальная плотность покрытия является случайной функцией от расстояния до подложки x ;
- изменение локальной плотности по слоям покрытия является случайным марковским процессом.

Структуру порошковых материалов описывают на основе равновесных случайных упаковок идентичных частиц. В таком подходе в качестве характеристик фазы выбираются координационные числа частиц порошкового материала и на основе предположения о равновероятности систем статистического ансамбля находят вероятности обнаружения различных фаз (1):

$$\rho_i = \frac{\exp(-b / \rho_i)}{\sum_{i=1}^{\nu} \exp(-b / \rho_i)}, \quad (1)$$

где ν - число фаз, b - множитель Лагранжа, используемый при отыскании условного экстремума, ρ_i - безразмерная плотность i -й фазы.

Основные параметры режимов прессования рассчитаны согласно предложенным в работах Вольфа, Лейба, Шмидта графическим зависимостям и формулам расчета параметров прессования с учетом вида используемого взрывчатого вещества. Оптимальные параметры взрывного прессования определяются

показателем γ , равным отношению массы взрывчатого вещества $m_{\text{ВВ}}$ к суммарной сумме прессуемого порошка $m_{\text{П}}$ и ампулы $m_{\text{А}}$ (2):

$$\gamma_{\text{ВВ}} = \frac{m_{\text{ВВ}}}{m_{\text{П}} + m_{\text{А}}} . \quad (2)$$

Для условий наших экспериментов значения коэффициента γ рассчитаны в пределах от 0,8 до 1,5 как обеспечивающие максимальную плотность прессовок. Далее, с учетом размеров использованных в экспериментах ампул (материал ампул сталь 3) и массы компактируемых порошков, были рассчитаны соответствующие значения массы взрывчатого вещества и объем его засыпки.

На рис. 1 представлен график поверхностного распределения безразмерной локальной плотности алмазometаллического композита: DBB=45 мм, состав матрицы - ПХ18Н9Т 40% и ПР-ФБХ6 60%. На рис. 2 представлена Экспериментальная гистограмма безразмерной локальной плотности алмазometаллического композита при DBB=45 мм, состав матрицы - ПХ18Н9Т 40% и ПР-ФБХ6 60%; сплошная линия – теоретическая функция распределения при $b=15$

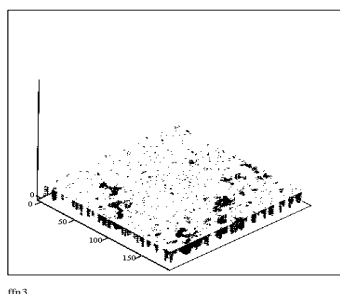


рис. 1

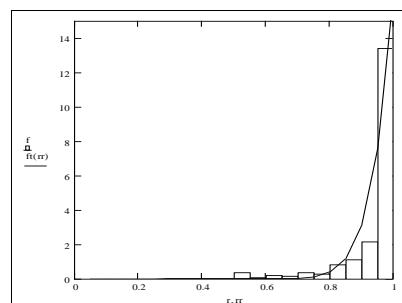


рис. 2

Анализ деформации кристаллической решетки H:Ti:LiNbO_3 методами рентгеновской дифрактометрии

Тайсин Ильяс Фаизович

*Шевцов Денис Игоревич, Азанова Ирина Сергеевна
Пермский Государственный Университет
Волынцев Анатолий Борисович, д. ф.-м.н.
taisin@psu.ru*

Кристаллы ниобата лития являются базовыми элементами приборов интегральной оптики, благодаря наличию уникальных электро-, упруго- и акустооптических свойств. На поверхности монокристаллического ниобата лития различными технологическими методами образуют оптический волновод. Наиболее распространенными способами являются диффузия титана вглубь подложки и протонный обмен. Такое вмешательство в структуру монокристалла ниобата лития приводит к деформации кристаллической решетки и определенным распределением деформации по глубине волноводного слоя. Глубина волновода, при этом, составляет 1-5 мкм. Волноводы, образованные диффузией титана, характеризуются гауссовым профилем концентрации титана по глубине, полученного с помощью решения уравнения диффузии. Волноводы, полученные посредством протонного обмена, не могут характеризоваться решением уравнения диффузии, поскольку данный процесс является химической реакцией обмена. Таким образом, на поверхности ниобата лития могут образоваться различные фазы, характеризуемые определенной концентрацией протонов и параметрами решетки. Не меньший интерес исследователей вызывают волноводы с двойным легированием, водородом и титаном.

Рентгеноструктурный анализ деформированной кристаллической решетки дает представление о наличии той или иной фазы, и характер последовательности фаз и профиль распределения деформации. В данной статье изложен метод определения профиля деформации кристаллической решетки волноводных слоев с помощью моделирования кривых рентгеновского рассеяния (кривых качания) от деформированного кристалла, применительно к волноводным слоям полученным двойным легированием. Данный метод позволяет численно получить глубину залегания каждого образованного слоя и величину деформации для каждого слоя. Моделирование основано на динамической теории дифракции, и включает в себя определение фактора Дебая-Уоллера искаженной решетки. Определение фактора Дебая-Уоллера дает возможность качественно охарактеризовать дефектную структуру исследуемых волноводов.

В ходе исследования впервые обнаружено несколько ранее неизвестных явлений. Обнаружено, что повышенная температура вносит существенные изменения в профиль деформации, тогда как профиль

показателя преломления практически не меняется. При термоциклировании обнаружена обратимость фазовых переходов в H:Ti:LiNbO_3 волноводных структурах.

Наноструктурные эффекты при синтезе KNbO_3

Тесленко Павел Юрьевич

Назаренко Александр Владимирович

Ростовский Государственный Университет

Кабилов Юрий Вагизович, к.ф.-м.н.

kupri@phys.rsu.ru

В последние годы установлено, что наноразмерные активные (менее 100нм) материалы, используемые в наноэлектронике, могут существенно отличаться по своим физическим параметрам от материалов в макрокристаллических (более 100нм) формах. В частности известно, что сегнетоэлектрические свойства оксидов с перовскитовой структурой (например, BaTiO_3 , PbTiO_3 и др.) в нанокристаллических состояниях подавляются — уменьшается спонтанная поляризация, снижается температура Кюри, а в ряде случаев имеют место и реконструктивные фазовые переходы в другие (несегнетоактивные) кристаллические фазы.

Как известно, KNbO_3 по своим особенностям физических свойств является достаточно полным аналогом классического сегнетоэлектрика BaTiO_3 . Если в BaTiO_3 наноразмерные эффекты подробно изучены, то для KNbO_3 подобные исследования никем не проводились.

Целью данной работы являлось изучение изменений структуры сегнетоэлектрического KNbO_3 при его твердофазном синтезе из стехиометрической смеси K_2CO_3 и Nb_2O_5 , то есть по мере роста кристаллитов KNbO_3 с перовскитовой фазой.

Исследования структурообразования KNbO_3 проведены в режиме "in situ" на автоматическом комплексе "рентген-структура", включающем рентгеновский дифрактометр ДРОН-3М, температурную камеру, обеспечивающую нагрев от 20 до 1000°C, и компьютер с управляющей экспериментом программой.

Ранее методом дифференциального термического анализа (ДТА) были установлены области критических температур, при которых происходят резкие изменения структур исходных для синтеза материалов и KNbO_3 . Методом рентгеновской дифракции определены кинетические параметры синтеза KNbO_3 . Специальное внимание обращено на изменения симметрии, параметров решетки и размеров областей идеальности в процессах синтеза и стабилизации перовскитовой структуры KNbO_3 .

Выявленные корреляции между микроскопическими (параметрами решетки и атомными параметрами) и мезоскопическими (размеры областей идеальности) характеристиками структуры KNbO_3 позволили описать не только наноструктурные эффекты, но и оценить ряд электрофизических параметров KNbO_3 в зависимости от наноразмеров кристаллических фаз.

Работа поддержана РФФИ (грант 04-03-32039а).

Изучение дефектов структуры монокристаллических сплавов Bi+Sb методом двухкristальной рентгеновской топографии в геометрии Брэгга

Тимофеева Юлия Вячеславовна

Дзюба Илья Владимирович

Новгородский Государственный Университет

Данильчук Леонид Нестерович, д.ф.-м.н.

dln@novsu.ac.ru

Висмут расположен в главной подгруппе пятой группы таблицы химических элементов Д.И. Менделеева и имеет ромбоэдрическую решётку, весьма близкую к кубической гранецентрированной. В электрическом отношении висмут является полуметаллом с малым перекрытием валентной зоны с зоной проводимости.

При легировании висмута сурьмой происходит изменение зонной структуры, характерной для висмута. При концентрации сурьмы более 8 ат. % исчезает перекрытие зон и полуметалл превращается в полупроводник.

Монокристаллы висмута и его сплавы с сурьмой находят широкое применение в различных областях науки и техники и, в частности, в охлаждающих устройствах, действующих на основе эффекта Эттингсхаузена.

Нами исследовался монокристалл $\text{Bi}_{187}\text{Sb}_{13}$, выращенный в лодочке методом зонной плавки с затравкой. Плотность дислокаций (по данным селективного травления) составляла $N_D \leq 10^5 \text{ см}^{-2}$. Образцы для исследований были получены путём скола по плоскости спайности замороженного в жидком азоте монокристалла.

Для съёмки рентгенотопограмм использовалось характеристическое $\text{CuK}_{\alpha 1}$ – излучение от трубки БСВ – 6 с линейчатым фокусом F, монохроматизированное путём отражения от плоскости (111) бездислокационного монокристалла германия M (рис.1). Исследуемый образец K был установлен в положение, когда возникало отражение (444) от плоскости спайности. Настройка на угол Брэгга производилась с помощью счётчика рентгеновских квантов С. Отражённый рефлекс регистрировался на ядерную фотопластинку Ф с эмульсией МК. В качестве рентгеновской камеры использовался теодолит типа ТТ-4. Столик с образцом закреплялся в гнезде теодолита, из которого была удалена оптическая система.

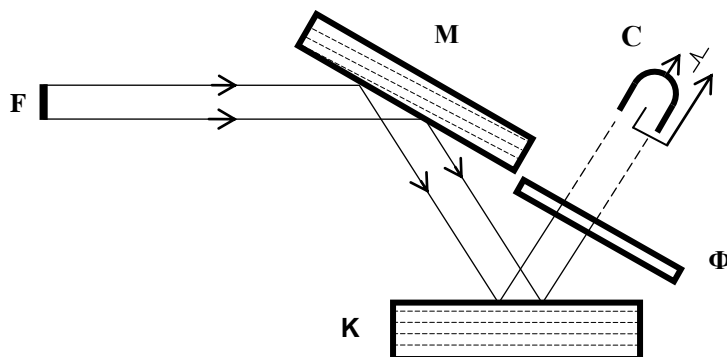


рис.1

Как видно из рентгеновских топограмм, монокристалл $\text{Bi}_{87}\text{Sb}_{13}$ содержит большое количество разнообразных дефектов: макрополей упругих деформаций, ступенек скола, сегрегационных полос роста, дислокаций, простых и тетраэдрических дефектов упаковки и ряд неидентифицированных дефектов.

Остановимся более подробно на дислокационной структуре. Часть дислокаций, наблюдавшихся в кристалле, оставались прямолинейными на протяжении до 1000 мкм и имели постоянную ширину изображения. Это свидетельствует о том, что они расположены в кристалле параллельно плоскости спайности. Их кристаллографические направления с хорошей степенью точности совпадают с $[\bar{1}10]$, $[01\bar{1}]$ и $[\bar{1}21]$. Часть дислокаций имеет двойной чёрно-белый контраст в виде конусов различной протяжённости. Это свидетельствует о том, что данные дислокации лежат наклонно относительно плоскости спайности. Чем ближе ось дислокации к тригональной оси $[111]$, тем короче протяжённость конуса. Наклонные дислокации имели кристаллографические направления, приближённо определённые, как $[010]$, $[101]$ и $[112]$. Большинство наблюдавшихся дислокаций имели большую краевую компоненту вектора Бюргерса, что характерно и для монокристаллов $\text{Bi}+\text{Sb}$, выращенных в трубочках [1].

Список публикаций:

[1] Данильчук Л.Н., Васильева Е.В. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, № 9, 49-52 (2002).

Исследование композиционных радиационно-защитных материалов

Токмаков Алексей Викторович

Галайда Вадим Валериевич

Красноярский Государственный Технический Университет

Курко Владимир Игоревич, д.ф.м.н.

director@nifti.krasnoyarsk.ru

Основным радиационно-защитным материалом является свинец. Однако он обладает следующими недостатками: 1. В силу своих технических свойств не может быть использован в качестве конструкционного материала. 2. Не может быть использован при высоких температурах. 3. Не может быть использован в качестве блокатора в композиционных материалах. 4. Токсичен.

Целью работы было разработка эффективных радиационно-защитных материалов для рентгеновского и γ -излучения.

В работе представлены следующие материалы:

Блокатор А1. Состав 95% PbTe и 5% эпоксидной смолы.

Блокатор А2. Состав 66,7% PbTe и 33,3% органического стекла.

Блокатор Б1. Состав 66,8% PbO, 20,16% SnO₂, 13,04% SiO₂.

Блокатор Б2. Состав 42,61% BaO, 44,35% Fe₂O₃, 13,04% SiO₂.

A1, A2- композиционные материалы на основе полимерных матриц с высоким содержанием интерметаллида PbTe. Б1, Б2-керамика.

Проводились измерения линейного коэффициента ослабления μ (см^{-1}), и массового коэффициента ослабления μ_m ($\text{см}^2/\text{г}$), при воздействии γ -излучения радионуклида ^{137}Cs с энергией 0,661МэВ и рентгеновского излучения в диапазоне энергий $20 < E_\gamma < 250 \text{кэВ}$. А также осуществлено сравнение с аналогичными характеристиками свинца.

В таблице приведены характеристики материалов по поглощению γ -излучения для $E=0,661\text{МэВ}(^{137}\text{Cs})$:

Материал	μ (см^{-1})	μ_m ($\text{см}^2/\text{г}$)	ρ ($\text{г}/\text{см}^3$)
Pb	1,18	0,104	11,34
A1	0,613	0,0997	6,15
A2	0,285	0,0971	2,94
Б5	0,432	0,0985	4,4
Б7	0,275	0,0772	3,6

При определении защитных свойств новых материалов по спектру рентгеновского излучения, генерируемого на вольфрамовых анодах рентгеновских трубок, были использован рентгеновский аппарат: РАП-150/300-10 при $U_a=250 \text{кВ}$; $I_a=8 \text{mA}$; $20 < E_\gamma < 250 \text{кэВ}$.

Для примера в таблице приведены кратности ослабления мощности экспозиционной дозы при разных толщинах:

Толщина образца d, мм	Кратность ослабления				
	Материал				
	Pb	A1	A2	Б1	Б2
5	17,8	12,5	7,5	11,8	6
13	22	19	11,5	18,6	10
20	22	21	19	20	17

Массовые коэффициенты ослабления указанных материалов практически не уступают массовому коэффициенту ослабления свинца.

Материалы по своим радиационно-защитным свойствам в защите от рентгеновского излучения с энергией $20 < E_\gamma < 250 \text{кэВ}$, при толщине 20 мм приближается к свинцу, при этом их плотность в $1,8 \div 3,68$ меньше свинца.

Керамический материал характеризуется повышенной долговечностью и способностью работать в химически агрессивных средах при высоких температурах (до 1000°C). Из керамики возможно изготовление контейнеров, тиглей, защитных экранов.

Материалы на основе полимерных матриц могут быть использованы в качестве конструкционного материала.

Исследование эффективности использования отходов горнодобывающей промышленности в производстве износостойких наплавочных материалов

Третьяков Семен Митрофанович

Институт физико-технических проблем Севера СО РАН

Винокуров Геннадий Георгиевич, к.т.н.

Tsm1982@mail.ru

Целью данной работы является обоснование применения отходов горнодобывающей промышленности и износостойких порошковых материалов для получения наплавочных электродов.

В хвостах добычи алмазов из кимберлитовых трубок имеются многие компоненты, пригодные для производства сварочных и наплавочных электродов: ильменит, доломит, пироксен и другие минералы. Институтом физико-технических проблем Севера СО РАН проводятся исследовательские работы по использованию минерального сырья Республики Саха (Якутия) и отходов горнодобывающей промышленности.

Для исследований из обогатительной фабрики № 12, была предоставлена проба из магнитного шлиха, удержанной магнитным шлюзом на последней стадии сброса хвостов, отситованной фракцией с диаметром зерен менее 0,5 мм. Часть этой пробы была разделена на магнитную, сильно-, слабо- и не- электромагнитную

фракции, которые составляли соответственно 21, 9, 12 и 58 % от общей массы пробы. В этой пробе отмечается очень высокая доля (примерно 90 % от общего объема) обломков доломита с мелкой сыпью черных рудных минералов (магнетита и ильменита), которые в зависимости от степени насыщенности рудными минералами попадают, как в магнитную, так и в разные электромагнитные фракции.

Предварительные данные спектрального анализа подтвердили достоверность минералогического анализа полученных фракций. Так, выяснено что в пробе ТУД1, ЭЛМ-1 фракция – 0.5 двуокись титана составила 41,92%, Fe₂O₃ – 42,87%, в пробе ТУД2 фракция – 0,5 двуокись титана составила 6,83%, Fe₂O₃ – 19,82%.

Для производства экспериментальной партии наплавочных электродов в качестве основного материала использовались промышленный порошок ПГ-СР4 и стандартная шихта на основе рутила. Износостойкие добавки ПГ-СР4 вводились в виде модифицирующих материалов шихты электродов и составляли 0%, 5%, 10%, 15% массы шихты 4 кг. В качестве связующего элемента шихты и порошка использовалось жидкое стекло, которое составляло 30% от массы шихты. Предварительно перемешанная шихта с модифицирующими добавками заливалась жидким стеклом. Далее прессованием были получены цилиндрические брикеты. Спрессованные брикеты использовались для получения наплавочных электродов из прутков диаметром 4мм. Полученные электроды просушивались в открытом сухом воздухе в течение 24 часов. После этого сушка проводилась 3 часа в сушильном шкафу при температуре 300°С.

Полученными электродами были изготовлены образцы для металлографических исследований и для определения химического и фазового состава.

Получение наплавочных материалов (электродов) с использованием отходов горнодобывающей промышленности будет способствовать комплексной переработке добываемого минерального сырья и разработке новых износостойких материалов.

Исследование морфологии поверхности и структуры эпитаксиальных пленок на основе халькогенидов свинца

Улитин Антон Васильевич

Аверин Игорь Александрович

Пензенский Государственный Университет

Аверин Игорь Александрович, к.ф.-м.н.

micro@diamond.stup.ac.ru

Эпитаксиальные пленки на основе халькогенидов свинца, а именно PbS и PbS_{1-x}Se_x, были получены методом "горячей стенки" с дополнительным источником халькогена в условиях близких к равновесным. Метод "горячей стенки" был реализован на промышленной установке вакуумного напыления. За один цикл напыления удается получить до 12 пленок с заранее заданными параметрами.

В качестве подложек, на которые осаждают пленки халькогенидов свинца, используют свежие сколы по плоскости (111) монокристаллов ВаF₂. Подложки изготавливают при комнатной температуре на воздухе непосредственно перед процессом напыления. Подложки из ВаF₂ имеют близкие значения периодов идентичности и коэффициентов теплового расширения с пленками халькогенидов свинца.

Для выбора условий синтеза, позволяющих получать эпитаксиальные пленки халькогенидов свинца высокого структурного совершенства, необходимо изучить кинетические закономерности получения пленок. Кинетические исследования представлены в виде диаграммы, построенной в координатах: скорость конденсации – температура подложки при постоянном давлении пара халькогена. В основу кинетических исследований положены результаты рентгеновского фазового и микроскопического анализов, исследования эффекта Холла, адгезии слоев к подложке, а также измерения коэффициента термо-ЭДС и его разброса по поверхности пленки, которые проводились более чем на 200 образцах халькогенидов свинца. Диаграмма содержит три характерные области. Рассмотрим морфологические исследования поверхности и структуры эпитаксиальных пленок на основе халькогенидов свинца.

Пленки халькогенидов свинца, полученные при условиях $T_n < 580$ К и $V_K \geq 10^{-10}$ м/с, характерных для области I, обладали сажеподобной поверхностью и состояли из множества блоков. Рентгеновский фазовый анализ показал поликристалличность пленок. На рентгендифрактограмме пленок халькогенидов свинца присутствуют практически все разрешенные рефлексы. Однако рефлексы (hhh) имеют значительно большую интенсивность. Рост пленок характеризуется крупными блоками с текстурой по плоскости (hhh). Присутствие второй фазы не обнаружено. Пленки имели очень низкую адгезию. При микроскопическом исследовании пленок наблюдается рыхлая поверхность. Изучение скола показало неоднородность пленок по толщине.

Пленки, типичные для области II ($580 < T_n < 750$ К, $V_K = 10^{-10} - 10^{-8}$ м/с), обладали зеркально-гладкой поверхностью. Рентгеновский фазовый анализ показал наличие только рефлексов (hhh). Полуширина линии рефлекса от плоскости (444) составляла 0,14 – 0,25°. При исследовании скола была установлена высокая

однородность пленки по толщине. Пленки халькогенидов свинца обладают высокой адгезией, характеризуются эпитаксиальным наращиванием и обладают высоким структурным совершенством.

Пленки, полученные при условиях $T_n > 600$ К и $V_k < 4 \cdot 10^{-10}$ м/с, типичных для области III, имеют характерный матовый оттенок. Микроскопические исследования поверхности и скола торца пленки показали, что на поверхности пленки имеется большое количество куполообразных фигур роста. Диаметр куполообразных фигур роста составлял 0,1 – 0,2 мкм, а их высота варьирует в пределах 1 – 6 мкм. Пленки обладали хорошей адгезией. Рентгеновский фазовый анализ показал наличие второй фазы свинца. Появление чистого свинца на поверхности пленок связано с дополнительным реиспарением атомов халькогена с поверхности пленки и увеличением коэффициента прилипания свинца к поверхности пленки при увеличении температуры подложки.

Одним из важнейших параметров, влияющих на эпитаксиальный рост и структурное совершенство пленок, является скорость конденсации. Зависимость скорости конденсации эпитаксиальных пленок халькогенидов свинца на подложках из BaF_2 от температуры испарения исходной загрузки хорошо описывается уравнением Герца – Кнудсена:

$$V_K = \alpha \cdot v \left(\frac{P_{ucn}}{\sqrt{2\pi mkT_{ucn}}} - \frac{P_n}{\sqrt{2\pi mkT_n}} \right),$$

где P_{ucn} , P_n – давление пара над испарителем исходной загрузки и подложкой соответственно; T_{ucn} , T_n – температура испарителя исходной загрузки и подложки соответственно; v – объем молекулы; m – масса молекулы; α – коэффициент реиспарения.

Установлено закономерное уменьшение скорости конденсации эпитаксиальных пленок при уменьшении температуры испарения исходной загрузки. Это обусловлено температурной зависимостью давления пара, существующего над исходной загрузкой.

Таким образом, на основе исследований морфологии поверхности и структуры эпитаксиальных пленок халькогенидов свинца определены условия синтеза в варианте метода «горячей стенки» с дополнительным источником халькогена, позволяющие синтезировать пленки высокого структурного совершенства.

Определение поверхностного потенциала пленок неупорядоченных полупроводников методом атомно – силовой микроскопии

Уточкин Иван Геннадьевич

Авачев Алексей Петрович, Нестеров Олег Евгеньевич

Рязанская Государственная Радиотехническая Академия

Вишняков Николай Владимирович, к.т.н.

utivan@dialup.etr.ru

Когда плотность глубоких дефектных состояний уменьшается, роль поверхности полупроводника возрастает и для понимания электрических свойств необходимо также знать и свойства поверхности. Два типа поверхностных состояний играют важную роль в a-Si:H. Один из них связан с фиксированным зарядом, который может быть встроен в поверхность и обуславливает сильный изгиб зон. Заряд может создаваться, например, адсорбированными газовыми молекулами, в частности H_2O или NH_3 . Второй тип поверхностного состояния представляет собой локализованный уровень внутри щели подвижности, возникающий из-за дефекта на поверхности или границе. Такие состояния представляют особый интерес, поскольку они влияют на результаты, полученные при исследовании эффекта поля.

Присутствие на поверхности неупорядоченного материала поверхностных состояний приводит к локализации на них свободных носителей. Поверхность полупроводника благодаря этому приобретает электрический заряд Q_{ss} , который обычно принимается локализованным в плоскости поверхности. В силу электронейтральности в целом этот поверхностный заряд в условиях равновесия нейтрализуется слоем пространственного заряда, простирающегося в глубину, на длину дебаевского экранирования L_D . Пространственный заряд Q_{sc} складывается из заряда ионизированных акцепторных и донорных уровней и заряда подвижных носителей, концентрация которых, в условиях равновесия, отлична от объемной концентрации. Появление заряда на поверхности приводит к изгибу энергетических зон в неупорядоченном полупроводнике в приповерхностной области уровня Ферми.

Работа посвящена изучению возможности определения поверхностного заряда на пленках неупорядоченных полупроводников с помощью атомно-силовой микроскопии, а именно методом зонда Кельвина[1].

После получения корректного топографического изображения поверхности на АСМ можно перейти к работе в методе поверхностных потенциалов (метод зонда Кельвина). Суть метода заключается в следующем: в

полуконтактном режиме при определенных параметрах сканирования (на первом проходе) измеряется поверхностный рельеф, затем (на втором проходе) зонд удаляется от (в отдельных случаях приближается к) поверхности образца на расстояние Z и проходит на этой высоте по измеренному рельефу в бесконтактном режиме, но уже с другими параметрами сканирования. Во время второго прохода на зонд подается переменное напряжение $U_1 \times \sin(\omega t)$, а изменением величины постоянного напряжения U_{BV} с использованием цепи обратной связи поддерживается равной нулю амплитуда колебания кантилевера (рис.1). Полученная таким образом карта изменения напряжения интерпретируется в соответствии с (1) как распределение поверхностного потенциала φ_s [1].

$$F_z(\omega) = -[(U_{BV} - \varphi_s) \times U_1 \times \sin(\omega t)] \times \frac{\partial C}{\partial Z}. \quad (1)$$

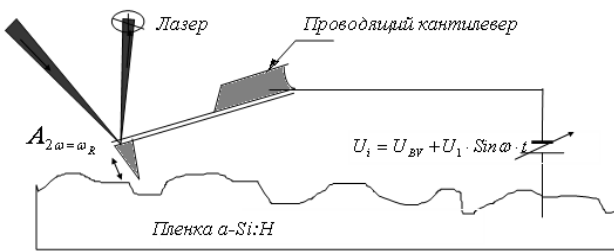


рис.1. Схема измерения в методе зонда Кельвина

между кантилевером и пленкой a-Si:H.

При изменении приложенного к структуре напряжения смещения положение локализованных состояний изменяется, следуя за смещением краев разрешенных зон. В результате происходит изменение заряда на локализованных состояниях, когда энергетический уровень локализованного состояния пересекает уровень Ферми.

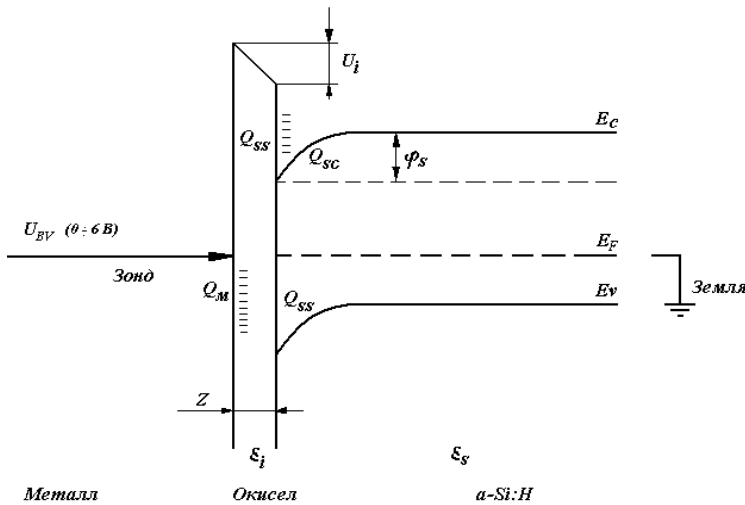


рис.2. Энергетическая диаграмма контакта металл/диэлектрик/a-Si:H.

поверхностного потенциала U_s :

$$\rho(U_s) = \frac{\epsilon_0 \epsilon_i^2}{\epsilon_s} \cdot \frac{U_{BV} - U_s}{Z^2}. \quad (4)$$

$$N(U_s) = \frac{\epsilon_0 \epsilon_i^2}{q \cdot \epsilon_s} \cdot \frac{U_{BV} - U_s}{Z^2}. \quad (5)$$

Свойства пленок a-Si:H, сформированных при мощности разряда $W = 200$ Вт, расходе силана $Q = 200$ см³/мин., время осаждение $t = 12$ мин., концентрации водорода $C_H = 12$ ат. %.

Схему измерения в методе зонда Кельвина (рис.1) можно представить как систему МОП (рис.2), тогда удельную емкость воздушной прослойки можно представить как емкость конденсатора:

$$C_i = \epsilon_0 \epsilon_i / Z \quad (2)$$

где Z - толщина диэлектрика, в данном случае это есть расстояние между системой зонд - образец, ϵ_0 - диэлектрическая проницаемость вакуума, $\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-14}$ Ф/см, ϵ_i - диэлектрическая проницаемость среды

U_i - падение потенциала на промежуточном слое; φ_s - поверхностный потенциал; Z - толщина промежуточного слоя (расстояние от образца, на котором зонд осуществляет второй проход); Q_{sc} - плотность объемного заряда в a-Si:H; Q_{ss} - плотность заряда поверхностных состояний a-Si:H; Q_M - плотность поверхностного заряда на кончике проводящей иглы.

Заряд на поверхности a-Si:H можно определить как:

$$Q_{ss} = -C_i \cdot (U_{BV} - U_s). \quad (3)$$

Используя закон Гаусса и решая уравнение Пуассона, выражение для плотности заряда $\rho(U_s)$ и концентрации ионизированных локализованных состояний в щели подвижности аморфного полупроводника N_{IE} в зависимости от

Образец	Тподл, °С	Р, Па	Voc, Å/с	D пленки по АСМ, нм	$\varphi_s(0)^*$, В (МЗК)	$\rho(\varphi_s)_2$ Кл/см ²	N _{IE} , см ⁻³	Дср., нм (АСМ)
ЯР10-1	40	132	12,0	709	-0,07	$5,57 \cdot 10^{-6}$	$3,48 \cdot 10^{13}$	400
ЯР10-2	100	157	16,2	709	-0,06	$4,77 \cdot 10^{-6}$	$2,98 \cdot 10^{13}$	300
ЯР10-3	175	189	16,9	709	-0,06	$4,77 \cdot 10^{-6}$	$2,98 \cdot 10^{13}$	350
ЯР10-4	250	220	11,3	709	-0,05	$3,98 \cdot 10^{-6}$	$2,47 \cdot 10^{13}$	400
ЯР10-5	325	252	5,6	709	-0,08	$6,37 \cdot 10^{-6}$	$4,00 \cdot 10^{13}$	500

* - Значение поверхностного потенциала при $U_{BV} = 0$ В.

Все экспериментальные результаты получены на АСМ «Solver Pro», производства компании NT-MDT г. Зеленоград. Работа проводится при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации.

Список публикаций:

[1]. Vatel O., Tanimoto M. Kelvin probe force microscope for potential distribution measurement of semiconductors devices// J. Appl. Phys. 77(6). 2358-2362 (1995)

Исследование электронных свойств кубанита CuFe_2S_3

Хабибуллин Илдар Хайдарович

Погорельцев Александр Ильич, Матухин Вадим Леонидович

Сафонов Александр Николаевич

Казанский Государственный Энергетический Университет

Матухин Вадим Леонидович, д.ф.-м.н.

alx_rus@mail.ru

В настоящее время особое внимание уделяется многокомпонентным полупроводниковым соединениям, которые обладают большим разнообразием электрофизических и оптических свойств по сравнению с элементарными и бинарными полупроводниками. В этом плане кубанит CuFe_2S_3 является очень интересным полупроводником, так как в своем составе содержит типичный магнитный ион Fe.

Ранее [1] нами были выполнены спектроскопические исследования данной системы. В результате этих исследований были получены величины константы квадрупольного взаимодействия и параметра асимметрии – $\nu_Q \approx 7.3$ МГц, $\eta \approx 0.82$, $C_{qcc}=2$, $\nu_Q \approx 14.6$ МГц (для ядерного спина меди $I = 3/2$). Для меди квадрупольная частота ν_Q и параметр асимметрии η связаны хорошо известными соотношениями с главными осями тензора градиента электрического поля ГЭП:

$$\nu_Q = \frac{1}{2} e^2 Q q_{zz} \left(1 + \frac{\eta^2}{3}\right)^{1/2} \quad (1)$$

где q_{zz} - наибольшая из главных осей тензора ГЭП; η - параметр асимметрии $\eta = (|q_{xx}| - |q_{yy}|)/|q_{zz}|$; eQ – ядерный электрический квадрупольный момент данного квадрупольного ядра.

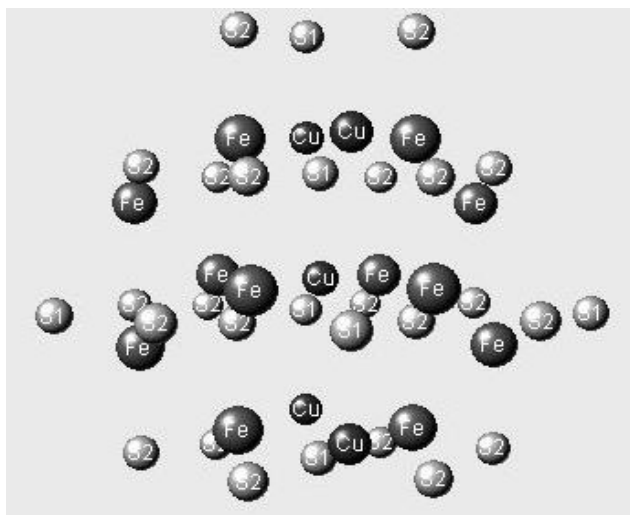


рис.1

В настоящей работе мы попытались получить распределение электронной плотности в области ядра меди, используя полученные квадрупольные параметры. С этой целью были выполнены *ab initio* оценки ГЭП на ядрах меди в системе CuFe_2S_3 в зависимости от формальных зарядов выбранных кластеров n . Наибольший кластер, используемый при расчетах - $\text{Cu}_5\text{Fe}_{12}\text{S}_{20}^n$ (см. рис.1). Расчеты выполнялись в рамках самосогласованного неограниченного метода Хартри - Фока (SCF-LCAO-UHF) с использованием базиса MINI. При проведении расчетов использовалась программа GAMESS [2,3].

Как следует из проведенных расчетов значения указанных параметров q_{zz} и η весьма чувствительны к величине n . Для данных

валентных конфигураций строились затем карты распределения электронной плотности в области квадрупольных ядер меди.

Список публикаций:

- [1] Погорельцев А.И., Матухин В.Л., Невзоров С.П., Исследование полупроводникового минерала $CuFe_2S_3$ методом ЯМР Си в локальном поле//Проблемы энергетики, №1-2, 2004.
[2] M.W.Schmidt, K.K.Baldrige, J.A.Boatz, S.T.Elbert, M.S.Gordon, J.J.Jensen, S.Koseki, N.Matsunaga, K.A.Nguyen, S.Su, T.L.Windus, M.Dupuis, J.A.Montgomery J. Comput. Chem., 1993, V. 14, P.1347.
[3] Alex A. Granovsky, [www.http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/index.html](http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/index.html)

Кинетика модификации спектров ЭПР при старении карбиноидных пленок

Хайруллина Наталия Ароновна

Соколова Мария Николаевна, Евсюков Сергей Евгеньевич

Челябинский Государственный Педагогический Университет

Песин Леонид Абрамович, д.ф-м.н.

po_nadu@cspi.urf.ac.ru

Два образца карбиноидов (далее образцы 1, 2) были синтезированы путем химического дегидрогалогенирования из частично кристаллических пленок поливинилиденфторида (ПВДФ) марки Кунар, любезно предоставленных фирмой Atofina (Франция). Образцы отличались продолжительностью взаимодействия с дегидрогалогенирующей средой – 24 и 26 часов, соответственно. Последняя состояла из смеси насыщенного раствора КОН в этаноле и ацетона в соотношении 1:9. В исходной пленке сигнал ЭПР отсутствует.

Спектры поглощения ЭПР образцов 1 и 2 записывались непрерывно в течение 5,5 и 8,5 часов с момента синтеза, а затем ежедневно в течение ~ 70 дней.

Для регистрации спектров использовался радиоспектрометр электронного парамагнитного резонанса РЭ 1306 с частотой клистрона 9,4 ГГц. В резонаторе спектрометра постоянно находился кристалл рубина, спектр которого использовался для нормировки по интенсивности.

Карбиноидная пленка дает сигнал ЭПР-поглощения с g-фактором, близким к 2. На рисунке 1 представлена зависимость нормированной интегральной интенсивности этого сигнала (с учетом массы) от времени, прошедшего с момента синтеза, для обоих исследованных образцов.

Из рисунка видно, что сигнал заметно уменьшается, причем скорость уменьшения зависит от продолжительности старения. Наиболее сильное уменьшение происходит в первый день; через 8-10 дней интенсивность сигнала практически стабилизируется.

У образца с большим временем дегидрогалогенирования кривая лежит выше (рис. 1), что свидетельствует о большей концентрации в нем парамагнитных центров.

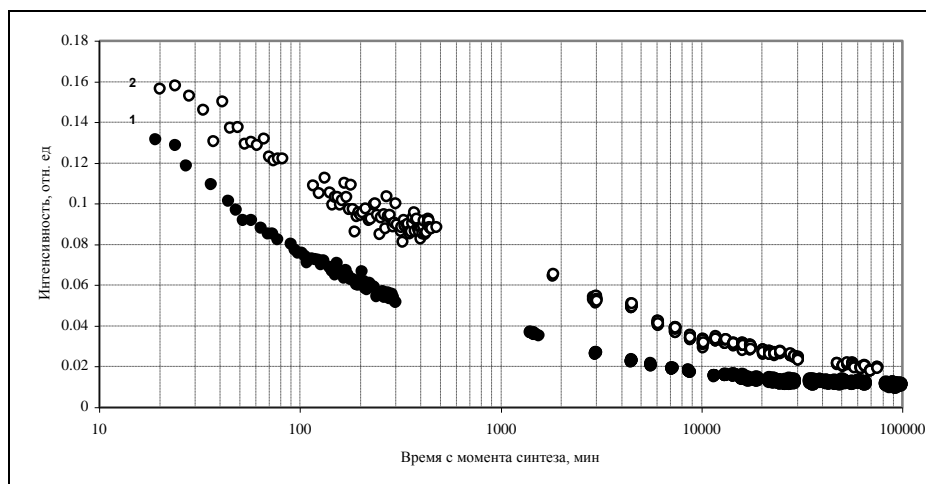


рис. 1

Такой характер зависимости обусловлен, предположительно, следующим процессом. Сразу после синтеза в образцах имеется большое количество двойных углерод-углеродных связей, т.е. участков с сопряженной связью, которые возникают в местах отщепления фтора и водорода от углеродного скелета. Это состояние системы не является стабильным. Разрушение связей может осуществляться за счет окисления (присоединения кислорода воздуха и целых гидроксильных групп). Наличие постоянного сигнала в карбиноидных образцах при дальнейшем их хранении обусловлено, по нашему мнению, локализацией π -

электронов между цепочками образцов. В этом случае величина сигнала пропорциональна количеству сшивок. Оба эффекта тем сильнее, чем выше степень химической карбонизации. Действительно, чем больше время взаимодействия образца с дегидрогалогенирующей средой, тем больше удаляется атомов фтора и водорода, и, следовательно, тем больше вероятность образования как двойных углерод-углеродных связей, так и сшивок.

Таким образом, результаты исследования сигнала ЭПР показывают, что в первое время после синтеза происходит наиболее существенная модификация карбиноидных пленок. Сходство зависимостей, полученных для образцов 1 и 2, свидетельствует о качественном подобии механизмов старения карбиноидов, несмотря на количественные различия, обусловленные условиями их синтеза. Представляет интерес некоторый вторичный процесс, непосредственно предвещающий стабилизацию структуры пленок и приводящий к слабому перегибу зависимостей в интервале 10000 – 17000 минут после окончания химического дегидрофторирования. Механизм этого процесса требует дальнейшего специального изучения.

Работа выполнена при поддержке регионального гранта РФФИ-Урал 04-02-96052.

Модификация структуры ПВДФ при глубокой радиационной карбонизации и последующей ионной бомбардировке

Чеботарёв Сергей Сергеевич

Евсюков Сергей Евгеньевич, Грибов Игорь Васильевич, Кузнецов Вадим Львович

Челябинский Государственный Педагогический Университет

Песин Леонид Абрамович д.ф.-м.н.

sergius@cspu.ru

Влияние рентгеновского излучения, электронной и ионной бомбардировки на деградацию поверхности поливинилиденфторида (ПВДФ) за последнее десятилетие исследовалось в ряде работ отечественными и зарубежными исследователями. Результатом таких воздействий на образец является эффект дегидрофторирования его поверхности, при котором значительно модифицируется электронная структура атомов углерода. Этот эффект исследуется большинством авторов преимущественно методами рентгеновской фотоэлектронной (РФЭС) и оже- спектроскопии и проявляется в изменении формы и интенсивности спектральных линий. Однако, остаётся ещё много вопросов о характере происходящих в образце сложных изменений и механизме этих процессов. Наиболее вероятно формирование на поверхности образца комплекса различных углеродных наноструктур, например: одномерных цепочек карбина, графито- и алмазоподобных кластеров, не исключено формирование фуллеренов и нанотрубок. Количественная доля этих фаз может определяться комбинацией рода, дозы облучения и спектрального состава фотонов. Таким образом, определение состояния электронной структуры углерода и его изменение под воздействием внешних условий методами электронной спектроскопии важно не только для изучения механизмов деградации его поверхности, но представляет самостоятельный научный интерес и имеет важное практическое значение.

Нами исследовалась радиационная карбонизация ПВДФ как новый метод синтеза одномерных углеродных структур. Эксперимент проведён с частично кристаллической плёнкой ПВДФ марки Кунар (тип 720, толщина 50 мкм), изготовленной методом экструзии, и любезно предоставленной фирмой Atofina (Франция). Эта плёнка была нами выбрана по той причине, что в ней полимерные цепочки имеют большую длину и высокую степень ориентированности по сравнению с аморфным ПВДФ. В этом случае можно предположить, что в процессе карбонизации межцепочечные сшивки менее вероятны. Образец подвергался длительному воздействию рентгеновского излучения (порядка 7000 мин) в процессе съёмки РФЭС. Затем карбонизованная плёнка ПВДФ подвергалась дозированной бомбардировке ионами Ag^+ . При бомбардировке образца ионами аргона использовался расфокусированный пучок ионов с энергией ~ 1 кэВ (при токе $\sim 0,5$ мкА). Четыре последовательные дозы облучения составляли: 0,2, 1,1, 3,9, $9,6 \cdot 10^{16}$ ион/см². РФЭС получены с помощью магнитного фотоэлектронного спектрометра ЭС ИФМ-4. Для возбуждения фотоэффекта использовалось монохроматическое излучение алюминиевого анода Al $K_{61,2}$ (1486,6 эВ).

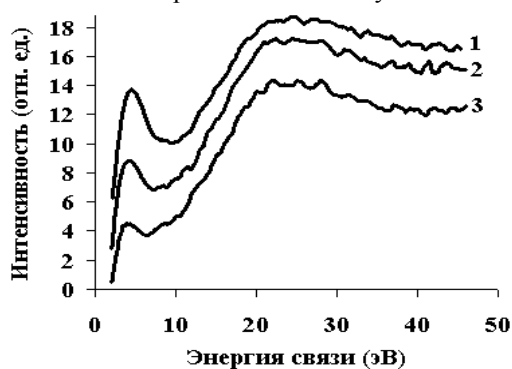


рис. 1

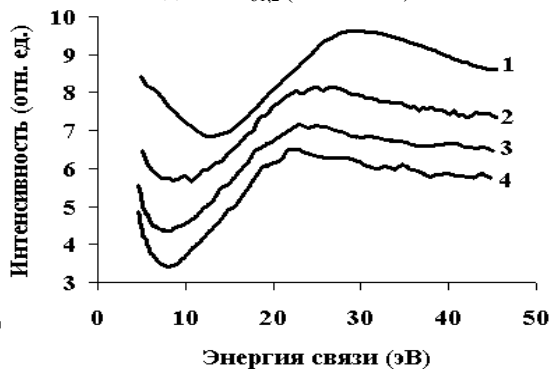


рис. 2

В процессе воздействия комбинации рентгеновского излучения и потока вторичных электронов происходит модификация структуры поверхности образца, которая проявляется в изменении параметров формы и интенсивности РФЭС и оже- спектров и зависит от продолжительности облучения. При малых временах экспозиции изменения можно объяснить следующим механизмом дегидрофторирования: $-(\text{CH}_2-\text{CF}_2)_n^- \rightarrow (\text{e}^- + \text{r}) \rightarrow -(\text{CF}_2-\text{CH}=\text{CF}-\text{CH}_2)_n^- + \text{HF}$. На этом этапе очевидна дублетная структура C1s - линии. Дальнейшее увеличение экспозиции приводит к формированию более длинных полимерных молекул на основе кумуленовых цепей карбина $-(\text{CH}=\text{C}=\text{C}/\dots/\text{=CH})-$. При этом происходит почти полное исчезновение второго пика, который обусловлен наличием атомов углерода, связанных с двумя атомами фтора. Однако после вычитания модельной C1s - линии из остовных спектров постепенно карбонизирующегося образца, нам удалось обнаружить в сателлитном спектре исчезающий пик при 3–8 эВ (рис. 1; последовательности кривых 1–3 соответствуют увеличению экспозиции), который связан с наличием уменьшающегося числа CF_2 - групп. Перед вычитанием проводилась перенормировка энергии связи: энергетическое положение главного максимума остовных спектров принималось равным нулю.

При более высоких временах экспозиции появляются межцепочечные шивки, число которых возрастает после ионной бомбардировки образца, что приводит к появлению в РФЭС и оже- спектрах особенностей, характерных для графита. В спектрах остовных электронов при вычитании модельной C1s - линии возникает особенность при 7 эВ, характерная для углерода в sp^2 - гибридной фазе (рис. 2; 1- максимальная экспозиция рентгеном ~7000 мин; 2 и 3 –соответственно min и max дозы ионной бомбардировки; 4 – для свежесколотой поверхности графита), увеличение дозы ионной обработки вызывает рост её интенсивности. Кроме того, с увеличением дозы ионной бомбардировки максимум широкого сателлитного спектра энергетических потерь сдвигается в сторону больших энергий связи. Этот факт также свидетельствуют о формировании межцепочечных шивок, что приводит к переходу углеродных атомов в sp^2 - гибридное состояние.

Работа выполнена при поддержке региональных грантов РФФИ - Урал 01-02-96475 и 04-02-96052.

Управление мощностью излучения при спекании керамических материалов в СВЧ печи

Чернышёв Вячеслав Валерьевич

Витебский Государственный Университет

Савчук В.К. к.ф.-м.н.

bokhan@vitebsk.by

1. Проблема управления излучением представляется одной из наиболее актуальных в физике и химии. Особенно это касается такого интересного раздела как протекание химических реакций в различных агрегатных состояниях вещества под воздействием сверхвысокочастотного (СВЧ) излучения. Этот интерес обусловлен тем фактом, что под действием электромагнитных излучений (полей), ряд химических превращений протекает совершенно иначе, чем в обычных условиях. Это открывает широкие перспективы для использования концентрированных потоков энергии переменных электрических и магнитных полей для управления и стимулирования химических реакций. Особенно большой интерес в этой связи представляет исследование характера твердофазных превращений в сегнетоэлектриках, из-за их широкого и многообразного использования в технике.

2. Полученные результаты свидетельствуют о существенном изменении характера кинетики твердофазных превращений при синтезе керамических материалов в переменных СВЧ полях. При этом оказывается, что величины диффузионных потоков в переменных полях различны для различных кристаллографических направлений и не описываются уравнениями формальной кинетики типа Яндера.

3. Показано, что под действием переменных полей происходит преимущественный рост зародышей в определенных кристаллографических плоскостях и амплитудой внешнего поля, длительностью воздействия возможно управление ростом зародышей новой (метастабильной) фазы.

Диэлектрические свойства поликристаллического ZnS

Шеваренков Денис Николаевич

Степанов Сергей Павлович

Нижегородский Государственный Университет

Щуров Александр Федорович, д.т.н.

Shevarenkov@phys.unn.ru

Сульфид цинка используется как оптический конструкционный материал для инфракрасной оптики, а изучение его диэлектрических свойств представляет значительный научный интерес. В данной работе исследовались диэлектрические свойства поликристаллического сульфида цинка, полученного методом химического газофазного осаждения CVD

Нами был произведен теоретический расчет диэлектрической проницаемости (для структуры сфалерита) в рамках метода связывающих орбиталей описанный Харрисоном [1].

Оптическая диэлектрическая проницаемость определяется откликом электронной подсистемы кристалла на высокочастотное электрическое поле [2]:

$$\varepsilon_{\infty} = 1 + 4\pi \frac{N(e\gamma d)^2}{12V_2} \alpha_c^3 \quad (1)$$

где N – плотность валентных электронов, d – равновесная длина связи, γ – масштабный множитель (для ZnS $\gamma=1.5$ [1]), α_c – степень ковалентности кристалла, e – заряд электрона, V_2 – энергия ковалентной связи которая определяется как:

$$V_2 = \eta \frac{\hbar^2}{md^2} \quad (2)$$

где \hbar – постоянная Планка, m – масса электрона, η – безразмерный коэффициент, определяющий значение матричных элементов межатомного взаимодействия.

При вычислении статической диэлектрической проницаемости следует учесть решеточный (ионный) вклад вдобавок к электронному [2]. В итоге статическая диэлектрическая проницаемость может быть выражена как

$$\varepsilon_0 = 1 + 4\pi \left(\frac{N(e\gamma d)^2}{12V_2} \alpha_c^3 * \left[1 + \frac{\alpha_p^2 (1 + \alpha_c^2)}{2\alpha_c^4} \right] \right) \quad (3)$$

где α_p - степень ионности кристалла

Нами была экспериментально измерена диэлектрическая проницаемость на двух частотах $f_1=0,1$ кГц и $f_2=30$ МГц. Возьмем значения диэлектрической проницаемости на этих частотах за статическую $\varepsilon(f_1)=\varepsilon_0$ и $\varepsilon(f_2)=\varepsilon_{\infty}$ оптическую диэлектрическую проницаемость. Теоретические значения диэлектрической проницаемости получились $\varepsilon_0=14.6$, $\varepsilon_{\infty}=4.6$, а экспериментальные соответственно $\varepsilon_0=12$, $\varepsilon_{\infty}=6$ (в литературе $\varepsilon_0=8.3$, $\varepsilon_{\infty}=5$ [3]).

Из приведенных данных видно что, теоретические значения не совпадают с экспериментальными. Данное расхождение можно объяснить тем, что расчет производился для идеального монокристалла, без учета границ зерен, дефектов и пр.

Как показали рентгеноструктурные исследования, в процессе получения образуется дефектная разупорядоченная структура - исследованные образцы CVD-ZnS являются нестехиометричными, с микронапряжениями II рода. Данные факты не могут не влиять на электронную подсистему.

Несовершенство геометрии связей, наличие незавершенных связей мы учли через изменение ковалентной связи кристалла. В формуле (2) коэффициент η , определяющий значение матричных элементов межатомного взаимодействия принимает значения от 2.16 (взаимодействие p-орбиталей), до 4.37 – для матричного элемента по двум гибридизированным орбиталям, направленным друг на друга (перекрывтие s- и p-орбиталей) и отвечает за длину, ориентировку и перекрывтие (гибридизацию) связей. Чем больше число разорванных и неправильно ориентированных связей, тем меньше значение коэффициента. Теоретический расчет диэлектрической проницаемости показал, что для CVD-ZnS значение параметра η для хорошего согласования с экспериментом следует брать ~ 2.8

Список публикаций:

- [1] У. Харрисон *Электронная структура и свойства твердых тел* (М., Мир, 1983) т. 1, с. 381.
 [2] С.Ю. Давыдов, С.К. Тихонов. *ФТТ*, 37(1), 3044 (1995).
 [3] Дж. Рейсленд *Физика фононов* (М., Мир, 1975)

Зарождение двухфазной зоны в процессах направленной кристаллизации

бинарных расплавов

Ширшов Илья Андреевич

Комаровский Максим Евгеньевич

Уральский Государственный Университет

Александров Дмитрий Валерьевич, д.ф.-м.н.

chirchik@r66.ru

Направленная кристаллизация бинарных расплавов является одним из способов получения твердых материалов, качество которых полностью определяется физическими и режимными параметрами процесса затвердевания. Хорошо известно, что при определенных условиях перед плоским фронтом затвердевания может возникать концентрационное переохлаждение [1], которое приводит к появлению метастабильной области перед фронтом. В этой переохлажденной области возможен рост кристаллов в форме дендритов, объемная кристаллизация на включениях примеси и т.д. Так как эта зона является переходной между уже сформировавшимся кристаллом и расплавом, она получила название двухфазной.

В случае образования двухфазной зоны картина кристаллизации меняется коренным образом. В частности, становится неприменимой классическая термодиффузионная модель Стефана. Для описания процесса кристаллизации можно использовать одну из математических моделей [2]-[4]. Однако, следует отметить, что в современной научной литературе существует множество других моделей процесса затвердевания с двухфазной зоной, учитывающих различные особенности последней. Одной из целей данного исследования явилось определение самого момента рождения двухфазной зоны и скорости затвердевания при различных теплофизических параметрах, характеризующих процесс кристаллизации. Установление времени образования двухфазной зоны определяет и временные рамки применимости модели Стефана для описания хода затвердевания.

Кроме чисто теоретического, исследование процессов затвердевания бинарных расплавов имеет и большое прикладное значение. Это связано с тем, что двухкомпонентные сплавы находят широкое применение в промышленности. Включение в некоторые металлы небольшого количества примеси позволяет значительно изменить механические свойства исходного материала. В качестве примеров можно привести недавно появившийся титанал (Ti-Al), сочетающий прочность титана с дешевизной алюминия, или всем известные железо-никелевые сплавы (Fe-Ni).

Проблема состоит в том, что характерное для кристаллизации бинарных расплавов образование двухфазной зоны в большинстве случаев отрицательно влияет на качество получаемого материала. Исследования структуры образцов сплавов показывают, что в местах предполагаемого образования метастабильной зоны наблюдается резкое отклонение концентрации примеси от среднего значения по образцу. Такой эффект получил название слоистой ликвации, т.к. примесь обычно концентрируется слоями, параллельными поверхности фронта кристаллизации. Вред слоистой ликвации очевиден, т.к. она приводит к сильной неоднородности механических и прочностных свойств получаемых из сплавов изделий и, следовательно, к снижению качества продукции и эффективности производства. Именно в связи с этим необходимо иметь в распоряжении методы, позволяющие как можно более точно определять время и место возможного образования двухфазной зоны.

В данной работе представлены результаты численных экспериментов, проведенных в соответствие с моделью, учитывающей образование двухфазной зоны [3]. В частности, получены качественные и количественные картины зависимости времени образования двухфазной зоны в расплаве Fe-Ni при двух различных режимах охлаждения последнего. По результатам вычислений можно также сделать вывод, что как в первом, так и во втором случае существуют такие значения параметров интенсивности охлаждения, при которых двухфазная зона образуется очень близко к правой границе образца, т.е. практически весь образец остается однородным. Выбор соответствующего режима охлаждения и его параметров дает возможность оптимизировать металлургический процесс, как по качеству получаемых сплавов, так и по скорости их получения.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов № 04-02-96002 (РФФИ Урал), № 04-02-96008 (РФФИ Урал), № Y1-PME-05-02 (CRDF и Минобразование РФ в рамках программы BRNE), REC: EK-005-00 [X1] (CRDF).

Список публикаций:

[1] Г.П. Иванцов, Доклады АН 81 (1951) 179.

[2] R.N. Hills, D.E. Loper and P.H. Roberts, *Q.J. Mech. Appl. Math.* 36 (1983) 505.

[3] D.V. Alexandrov, A.G. Churbanov and P.N. Vabishchevich, *Int. J. Fluid Mech. Res.* 26 (1999) 248.

[4] A.C. Fowler, *IMA J. Appl. Math.* 35 (1985) 159.

Определение фоточувствительности различных химических форм висмута в светочувствительной композиции ПВС-ZnO-BiCl₃

Штарев Дмитрий Сергеевич

К.С. Макаревич

Дальневосточный Государственный Университет Путей Сообщения

Просанов Игорь Юрьевич, д.ф.-м.н.

Shtarev@mail.ru

Интенсивные исследования несеребряных светочувствительных сред для кино- и фотографии ведется на протяжении последних 40 лет. Особое место среди них занимают материалы на основе поливинилового спирта (ПВС). С 80-х годов начались исследования новой группы материалов на основе композиции поливиниловый спирт-оксид цинка/диоксид титана (ПВС-ZnO/TiO₂), которые относятся к твердофазным гетерогенным фотокаталитическим системам.

Химические вещества, обуславливающие образование видимого изображения в рассматриваемых материалах могут быть либо неорганической природы – зерна металла (как, например, в композиции ПВС-ZnO-Pb(CH₃COO)₂); либо органической – продукты изменения ПВС – полиэновые структуры (как в композиции ПВС-ZnO-CuCl₂). Осуществление того или иного механизма формирования изображения существенно зависит от выбранного сенсibilизатора.

Целью работы являлось определению влияния Вида хлоридных комплексов висмута сенсibilизатора на фотографические свойства твердофазной гетерогенной фотокаталитической системы.

В качестве фотокаталитической системы бралась композиция ПВС-ZnO, сенсibilизированная растворами хлорида висмута (BiCl₃) с различными значениями кислотности (pH) и концентрации ионов хлора (pCl).

При растворении сенсibilизатора в воде образуются не менее 10 комплексов, характеризующих различные химические формы иона висмута: Bi^{+3} , $BiCl^{+2}$, $BiCl_2^{+1}$, $BiCl_3$, $BiCl_4^{-1}$, $BiCl_5^{-2}$, $BiCl_6^{-3}$, $BiOH^{+2}$, $Bi(OH)_2^{+1}$, $Bi(OH)_3$, $Bi(OH)_4^{-1}$.

Построены номограммы состояния различных форм ионов висмута, по которым можно определить мольные доли различных комплексов в зависимости от pH и pCl.

Построены зависимости оптической плотности почернения от концентрации ионов хлора в растворе сенсibilизатора при различном времени экспонирования фотоматериала.

На основании полученных графических зависимостей выявлены хлорные комплексы висмута висмута, проявляющие наибольшую фоточувствительность при использовании в качестве сенсibilизатора в системах ПВС-ZnO.

На основании сравнения теоретически рассчитанных номограмм и практически полученных зависимостей, был сделан вывод о возможности параллельного протекания обоих механизмов образования почернения (изменение структуры полимера и фотовосстановление металла) в фоточувствительной композиции ПВС-ZnO-BiCl₃.

Фазовые превращения в оксидах тяжелых металлов в условиях механоактивации

Эльберг Мария Сергеевна

Красноярский Государственный Технический Университет

Кирко Владимир Игоревич, д.ф.-м.н.

director@nifti.krasnoyarsk.ru

В работе изучается поведение оксидов тяжелых металлов (PbO, Bi₂O₃) при механоактивации. Механическая обработка этих оксидов представляет интерес с точки зрения их дальнейшего использования в качестве блокаторов радиационно-защитных материалов.

Механоактивация проводилась на планетарно-центробежной мельнице АГО-2У с частотой вращения ω равной 11,5 с⁻¹. Физико-химические превращения структуры материалов в результате механоактивации исследовались методом рентгеноструктурного анализа на автоматизированном аппарате ДРОН-3 (CuK _{α} -излучении).

В работе проведен ряд экспериментов по механоактивации оксидов свинца β -PbO и висмута α -Bi₂O₃ и системы 6Bi₂O₃·PbO.

Установлено изменение размеров макроблоков, симметрии коэффициента искажения кристаллической решетки оксидов. Показано, что при механоактивации оксида свинца происходит фазовый переход: β -PbO (ASTM 5-570, орторомбическая система, желтые кристаллы), в α -PbO (ASTM 5-561, тетрагональная система, красные кристаллы). Исходный размер макроблоков β -фазы составил 4.45 нм, размер макроблоков α -фазы, формирующейся в результате механоактивации, изменяется в зависимости от времени обработки от 0.5 нм (10 минут) до 0.89 нм (60 минут), что связано, по всей видимости, с постепенной коалесценцией зародышей новой фазы. Соответственно, коэффициент искажения решетки фазы α -PbO уменьшается от 6,3 (10 минут) до 3,48 (60 минут) вследствие формирования новой кристаллической структуры, в результате чего происходит упорядочение структуры с последующим увеличением ее симметрии.

При механоактивации α - Bi_2O_3 (ASTM 14-699, псевдоорторомбическая структура) фазового перехода не наблюдается. При обработке материала происходит уменьшение размера макроблока от 1,65 нм до 0,8 нм (60 минут) и, соответственно, увеличение микроискажения кристаллической решетки. С увеличением времени обработки коэффициент искажения увеличивается от 1,33 до 4,3 (60 минут) и в результате уменьшается симметрия структуры кристалла.

В настоящей работе исследовался процесс механоактивационного синтеза в системе PbO - Bi_2O_3 для различных составов. Механоактивационным синтезом получено соединение $\text{Bi}_{12}\text{PbO}_{24}$ со структурой силениита.

В задачу наших исследований входило наблюдение дефектообразований в оксидах свинца β -PbO и висмута α - Bi_2O_3 , а также особенности механохимических реакций под влиянием механической активации.

Усталость сегнетомягкой керамики на основе ЦТС, модифицированной германием, при реполяризации

Юхнов Игорь Васильевич

Ростовский Государственный Университет

Гавриляченко Виктор Георгиевич д.ф.-м.н.

yuhnov@phys.rsu.ru

Сегнетоэлектрические материалы находят широкое применение в устройствах электронной техники. В тех из них, где используется реполяризация, наблюдается явление электрической динамической усталости, проявляющееся в том, что по мере роста числа циклов переключения уменьшается остаточная поляризованность. Это снижает эффективность устройства и, в конечном итоге, приводит к его деградации.

Нами исследовалась электрическая динамическая усталость материала ЦТС, модифицированного германием. Этот материал относится к группе сегнетомягких, отличающихся низким значением коэрцитивного поля E_c и высоким значением остаточной поляризованности $P_0 \sim 30$ мкКл/см². Образцы подвергались длительной циклической реполяризации напряжением синусоидальной формы с частотой $f=50$ Гц в установке, основой которой является известная схема Сойлера-Тауэра. Из петель диэлектрического гистерезиса определялись зависимости относительной величины переключающейся поляризованности P_n/P_0 и E_c от числа циклов переключения N . Кроме того, после определённого числа циклов переключения исследовались реверсивные характеристики диэлектрической проницаемости $\epsilon_p(E)$.

Было установлено, что в исследованных образцах при воздействии большого числа циклов переключения, P_0 заметно падает. Так, при $N=10^6$, величина P_0 снижается на 35-40%, а коэрцитивное поле плавно уменьшается примерно на 15%.

Из реверсивных характеристик следует, что большое число циклов переключения подавляет нелинейные свойства образцов, при этом диэлектрическая проницаемость также заметно снижается.

Эффект усталости в образцах можно частично устранить, используя термическую обработку. Однако, если образцы испытали число циклов переключения порядка 10^5 и более, то их свойства не восстанавливаются, то есть они получают необратимые повреждения.

Исследование микроструктуры и доменной структуры кристаллитов показывают, что в процессе усталости в керамике накапливается большое число микротрещин как по межзёрненным границам, так и в массиве кристаллитов, а доменная структура последних усложняется за счёт образования сложных сочетаний двойников.

По результатам работы делается вывод о том, что основной причиной усталостных повреждений сегнетомягкой керамики ЦТС, модифицированной германием, является накопление дефектов кристаллической структуры в процессе непрерывного двойникового и раздвойникового кристаллитов, сопровождающего реполяризацию.