

## 18-Материаловедение

Бок Андрей Анатольевич  
Уфа, Института физики молекул и кристаллов УНЦ РАН  
**Визуализация наноструктурированных электропроводящих областей полимерной плёнки полидифениленфталида**  
Лачинов Алексей Николаевич, д.ф.-м.н.  
e-mail: [Andrey-bok@mail.ru](mailto:Andrey-bok@mail.ru) стр. 573

Болдин Максим Сергеевич, магистрант 1 года обучения  
Нижегород, Нижегородский государственный университет, физический  
**Исследование зарождения трещин коррозионного растрескивания под напряжением в низколегированных трубных сталях**  
Чувильдеев Владимир Николаевич, д.ф.-м.н.  
e-mail: [slimsoul@mail.ru](mailto:slimsoul@mail.ru) стр. 573

Бутусова Елена Николаевна, магистрант 1 года обучения  
Нижегород, Нижегородский государственный университет, физический  
**Экспериментальное исследование распространения трещин в трубных сталях при коррозионно-усталостных испытаниях**  
Чувильдеев Владимир Николаевич, д.ф.-м.н.  
e-mail: [Anelka13@yandex.ru](mailto:Anelka13@yandex.ru) стр. 575

Вдовенко Анна Александровна, 5 курс  
Кемерово, Кемеровский государственный университет, физический  
**Определение изменения структуры и механических свойств медных проводов при нагреве**  
Колесников Лев Васильевич, д.ф.-м.н.  
e-mail: [kissanna86@mail.ru](mailto:kissanna86@mail.ru) стр. 576

Горичева Анна Викторовна, 6 курс  
Челябинск, Челябинский государственный университет, физический  
**Высокотемпературные in situ исследования термостабилизации ПАН волокна**  
Тюменцев Василий Александрович, д.х.н.  
e-mail: [gorianna@mail.ru](mailto:gorianna@mail.ru) стр. 577

Грекова Татьяна Сергеевна, 5 курс  
Омск, Омский государственный университет, физический  
**Интерпретация наблюдаемого массопереноса в металлах при высокоинтенсивном воздействии импульсно-периодическим пучком заряженных частиц**  
Вершинин Георгий Анатольевич, к.ф.-м.н.  
e-mail: [vershinin@phys.omsu.omskreg.ru](mailto:vershinin@phys.omsu.omskreg.ru) стр. 578

Дудова Надежда Рузилевна, м.н.с.  
Уфа, Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, нет  
**Ближний порядок в крупнозернистом и нанокристаллическом нихроме**  
Валитов Венер Анварович, к.т.н.  
e-mail: [nadya\\_019@mail.ru](mailto:nadya_019@mail.ru) стр. 579

Закирова Альбина Азалитовна, м.н.с.  
Уфа, Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, нет  
**Углеродистые стали после интенсивной пластической деформации**  
e-mail: [karabaka02@mail.ru](mailto:karabaka02@mail.ru) стр. 580

Захаревич Елена Евгеньевна, аспирант  
Новосибирск, Новосибирский государственный технический университет, механико-технологический  
**Ультразвуковая обработка сварных соединений низкоуглеродистых сталей**  
Батаев Анатолий Андреевич, д.т.н.  
e-mail: [zaharevich81@mail.ru](mailto:zaharevich81@mail.ru) стр. 581

Зяблицева Екатерина Владимировна, аспирант  
Киров, Вятский государственный университет, химический  
**Поиск новых индий- и галлийпроводящих твердых электролитов**  
Леушина Аделаида Пантелеевна, к.х.н.  
e-mail: [amel@mail.ru](mailto:amel@mail.ru) стр. 583

Исаченко Дмитрий Сергеевич, ассистент  
Томск, Томский политехнический университет, физико-технический  
**Кольцевой фронт горения, реализующийся при синтезе бориды вольфрама**  
Долматов Олег Юрьевич, к.ф.-м.н.  
e-mail: [isachenko@k21.phtd.tpu.ru](mailto:isachenko@k21.phtd.tpu.ru) стр. 584

Квашнин Александр Геннадьевич, 2 курс  
Красноярск, Сибирский федеральный университет, физический  
**Изучение реконструкции поверхности кремниевых нановолокон различного вида**  
Сорокин Павел Борисович, к.ф.-м.н.  
e-mail: [cvashnini@g-service.ru](mailto:cvashnini@g-service.ru) стр. 586

Квашнин Дмитрий Геннадьевич, 2 курс  
Красноярск, Сибирский федеральный университет, физический  
**Исследование механических свойств SiC нановолокон**  
Сорокин Павел Борисович, к.ф.-м.н.  
e-mail: [cvashnini@gmail.com](mailto:cvashnini@gmail.com) стр. 587

Ковальчук Екатерина Петровна, м.н.с.  
Москва, Институт синтетических и полимерных материалов РАН, лаборатория физ.химии  
**Автоколебательное пластическое деформирование полимеров**  
Баженов С.Л., д.ф.-м.н.  
e-mail: [kotja777@yandex.ru](mailto:kotja777@yandex.ru) стр. 589

Корзникова Елена Александровна, аспирант  
Уфа, Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, группа физических методов исследования  
**Исследование дефектной структуры в Cu и Ni после интенсивной пластической деформации**  
Мулюков Х.Я., д.т.н.  
e-mail: [helenne@yandex.ru](mailto:helenne@yandex.ru) стр. 590

Мартюшев Никита Владимирович, аспирант  
Томск, Томский политехнический университет, МСФ  
**Угар и ликвация свинца при выплавке свинцовистых бронз**  
Егоров Ютий Петрович, к.т.н.  
e-mail: [nikitoid@mail.ru](mailto:nikitoid@mail.ru) стр. 592

Мелёхин Николай Владимирович, аспирант  
Нижний Новгород, НИФТИ ННГУ, физический  
**Экспериментальное и теоретическое исследование термической стабильности микроструктуры и свойств микрокристаллических хромовых бронз**  
Чувильдеев Владимир Николаевич, д.ф.-м.н.  
e-mail: [melehin@nifti.unn.ru](mailto:melehin@nifti.unn.ru) стр. 593

Мордовской Петр Григорьевич, вед. инженер  
Якутск, Институт физико-технических проблем Севера СО РАН, отдел материаловедения  
**Перспектива производства деталей типа `вал`**  
Борисова Мария Захаровна, к.т.н.  
e-mail: [mordov@yandex.ru](mailto:mordov@yandex.ru) стр. 594

Перевалов Андрей Павлович, 4 курс  
Иркутск, Иркутский государственный университет, физический  
**Предварительные данные исследований технологии Light Scribe**  
Мартынович Евгений Фёдорович, д.ф.-м.н.  
e-mail: [velkormchy@rambler.ru](mailto:velkormchy@rambler.ru) стр. 595

Перевалов Андрей Павлович, 4 курс  
Иркутск, Иркутский государственный университет, физический  
**Нанотехнологии в телекоммуникациях**  
Гаврилюк Алексей Александрович, к.ф.-м.н.  
e-mail: [velkormchy@rambler.ru](mailto:velkormchy@rambler.ru) стр. 596

Попов Максим Николаевич, аспирант  
Красноярск, Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, нет  
**Моделирование и расчет физико-химических параметров процесса диффузии атомарного водорода на поверхности нанотруб различного размера и хиральности**  
Овчинников Сергей Геннадьевич, д.ф.-м.н.  
e-mail: [max.n.popov@gmail.com](mailto:max.n.popov@gmail.com) стр. 597

Попова Анна Николаевна, аспирант 1 года обучения  
Кемерово, Кемеровский государственный университет, химический  
**Наноразмерные порошки системы FeCo: фазовый анализ**  
Захаров Юрий Александрович, д.х.н.  
e-mail: [zaharov@kemsu.ru](mailto:zaharov@kemsu.ru) стр. 599

Порошков Артем Владимирович, аспирант 2 года обучения  
Нижний Новгород, Нижегородский государственный университет, физический  
**Вклад полос перлита в предел прочности стального проката из низкоуглеродистой трубной стали**  
Чувильдеев Владимир Николаевич, д.ф.-м.н.  
e-mail: [poroshkov@nifti.unn.ru](mailto:poroshkov@nifti.unn.ru) стр. 601

Раимова Мария Алиджановна, 5 курс  
Красноярск, Сибирский федеральный университет, химический  
**Квантово - химическое исследование структуры и свойств нанотруб на основе диборида магния**  
Кузубов Александр Александрович, к.ф.-м.н.  
e-mail: [marry-ray@ya.ru](mailto:marry-ray@ya.ru) стр. 601

Соболева Эльвира Гомеровна, ст. преподаватель  
Юрга, Юргинский технологический институт (филиал) Томского политехнического университета, экономики и менеджмента  
**Анизотропия ангармонизма в кристаллах галогенатов натрия**  
Беломестных Владимир Николаевич, д.ф.-м.н.  
e-mail: [sobolevaeno@mail.ru](mailto:sobolevaeno@mail.ru) стр. 602

Стебелева Олеся Павловна, аспирант 1 года обучения  
Красноярск, Сибирский федеральный университет, физический  
**Изучение характера агрегации углеродных частиц в сажах после гидродинамической кавитации**  
Кашкина Людмила Васильевна, Кулагин Владимир Алексеевич, к.ф.-м.н., д.т.н.  
e-mail: [kafedra@nifti.krasnoyarsk.ru](mailto:kafedra@nifti.krasnoyarsk.ru) стр. 604

Ушанова Элина Артуровна, 5 курс  
Уфа, Уфимский государственный авиационный технический университет, авиационно-технологических систем  
**Влияние нанокристаллической структуры сплава АМгб на кинетическую ионно-электронную эмиссию**  
Зубаиров Линар Раисович, к.ф.-м.н.  
e-mail: [elinaushanova@rambler.ru](mailto:elinaushanova@rambler.ru) стр. 605

Фазлитдинова Альфия Габдиловна, 6 курс  
Челябинск, Челябинский государственный университет, физический  
**Взаимосвязь степени кристалличности и физико-механических свойств ПАН нити**  
Саунина Светлана Ивановна, к.ф.-м.н.  
e-mail: [fazlitdinovaag@mail.ru](mailto:fazlitdinovaag@mail.ru) стр. 606

Хадкевич Антон Валерьевич, ассистент  
Томск, Томский политехнический университет, физико-технический  
**Динамика формирования ударной волны и ее вырождения при воздействии на металл импульсных ионных пучков с плотностью мощности  $10^7 - 10^{10}$  Вт/см<sup>2</sup>**  
Ющичин Константин Владимирович, к.ф.-м.н.  
e-mail: [hadkevich@phtd.tpu.ru](mailto:hadkevich@phtd.tpu.ru) стр. 607

Харасов Динар Уралович, 6 курс  
Уфа, Башкирский государственный университет, физический  
**Анализ сигнала вихретокового дефектоскопа при контроле стального изделия**  
Загидулин Ринат Васикович, д.т.н.  
e-mail: [Kharasov\\_DY@mail.ru](mailto:Kharasov_DY@mail.ru) стр. 609

Хасанова Гузель Флюоровна, 5 курс  
Уфа, Уфимский государственный авиационный технический университет, авиационно-технологических систем  
**Влияние температурно-скоростных условий деформации на формирование ультрамелкозернистой структуры сплава Zr-2.5%Nb**  
Валиахметов Олег Рязович, к.т.н.  
e-mail: [guzelechka-86@mail.ru](mailto:guzelechka-86@mail.ru) стр. 610

Чепкасов Сергей Юрьевич, аспирант  
Новосибирск, Новосибирский государственный университет, физический  
**Исследование оптических свойств углеродородных пленок, осажденных из плазмы тлеющего разряда**  
Золкин Александр Степанович, к.ф.-м.н.  
e-mail: [trance@gorodok.net](mailto:trance@gorodok.net) стр. 611

Чуриков Виталий Владимирович, 6 курс  
Челябинск, Челябинский государственный университет, физический  
**Изменение линейных размеров полиакрилонитрильной нити**  
Саунина Светлана Ивановна, к.ф.-м.н.  
e-mail: [briket\\_85@mail.ru](mailto:briket_85@mail.ru) стр. 612

Шотин Сергей Викторович, аспирант  
Нижний Новгород, НИФТИ ННГУ, физический  
**Влияние термо-механической обработки на физико-механические свойства новых микрокристаллических сплавов системы Al-Si-Cu**  
Грязнов Михаил Юрьевич, к.ф.-м.н.  
e-mail: [Shotin@nifti.unn.ru](mailto:Shotin@nifti.unn.ru) стр. 613

Юдин Андрей Леонидович, зав. лаб.  
Кемерово, Кемеровский государственный университет, физический  
**Исследование химического состава поверхности наночастиц серебра методом РФЭС**  
Колесников Лев Васильевич, д.ф.-м.н.  
e-mail: [andrey@kemsu.ru](mailto:andrey@kemsu.ru) стр. 613

## **Визуализация наноструктурированных электропроводящих областей полимерной плёнки полидифенилфталаида**

**Бок Андрей Анатольевич,**

*Ерохин Евгений Викторович, Шаймарданов Булат Айдарович  
Института физики молекул и кристаллов РАН УНЦ*

*Алексей Николаевич Лачинов, д.ф.-м.н.*

*[Andrey-bok@mail.ru](mailto:Andrey-bok@mail.ru)*

В конце прошлого века в институте органической химии Уфимского научного центра РАН были синтезированы новые полимеры, обладающие уникальными электронными свойствами. Например, в этих полимерах наблюдалась очень высокая электропроводимость, сравнимая по своей величине с металлической. В тоже время эти полимеры могли быть хорошими диэлектриками.

Эти уникальные свойства в полимерах возникают в тонких плёнках толщиной меньше 1 мкм. Природа этого явления до сих пор не ясна. Известно, что не вся полимерная плёнка становится электропроводящей. В связи с этим целью настоящей работы является визуализация электропроводящих областей в полимерных плёнках с помощью нематических жидких кристаллов (НЖК).

Работа была выполнена в институте физики молекул и кристаллов с использованием в качестве полимера полидифенилфталаид, в качестве НЖК – метоксибензилиденбутиланилин. Экспериментально задача решалась с использованием поляризационно-оптического микроскопа Amplival – Pol U.

Удалось визуализировать различные дефектные структуры в планарно-ориентированном на поверхности полимера НЖК.

Установлено, что дефектная структура связана с местами локализации высоко проводящих областей. Показано, что при приложении электрического поля возникает деформация в слое НЖК вблизи отдельных высоко проводящих областей полимерной плёнки. Впервые удалось воспроизвести данные научной работы 1990г., заключающиеся в том, что с увеличением напряжения увеличивается число и размеры проводящих доменов. Установлено, что в жидком кристалле над областями проводящих доменов возникает электрогидродинамическая неустойчивость при относительно больших напряжениях. Обнаружен гистерезис по напряжению возникновения и исчезновения «крестиков» (сферолитов).

В докладе приводится анализ полученных результатов и делается вывод о высокой эффективности применения метода НЖК.

## **Исследование зарождения трещин коррозионного растрескивания под напряжением в низколегированных трубных сталях**

**Болдин Максим Сергеевич**

*Чегуров Михаил Константинович, Нохрин Алексей Владимирович, Чувильдеев Владимир Николаевич*

*Научно-исследовательский физико-технический институт*

*Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского*

*Чувильдеев Владимир Николаевич, д.ф.-м.н.*

*[slimsoul@mail.ru](mailto:slimsoul@mail.ru)*

Экспериментальным и теоретическим исследованиям процесса коррозионного растрескивания под напряжением (КРН) посвящено большое число работ. Однако до настоящего времени в литературе отсутствуют дающие удовлетворительное сопоставление с экспериментом модели, позволяющие описывать влияние параметров структуры стали на процессы зарождения и роста трещин КРН. В этой связи, целью данной работы является экспериментальное исследование влияния структурных факторов на процесс зарождения трещин КРН в трубных сталях.

Объектами исследования являлись трубные стали 10Г2ФБ, 17Г1С-У и 19Г полученные по технологии контролируемой прокатки, нормализации и горячей прокатки, находившиеся в различных структурных состояниях (состояние поставки и после длительной эксплуатации). Испытания плоских образцов 2x10x65 мм проводились по схеме «трехточечный изгиб» в 1% и 0.01% водном растворе H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>. В процессе эксперимента фиксировалось время инкубационного периода до появления первой трещины КРН ( $\tau_{\text{инк}}$ ), а также время дорастания трещины до заданного критического размера ( $\tau_5$ ). Испытания проводились в интервале напряжений от 50 МПа до предела текучести.

Проведенные экспериментальные исследования позволили установить, что зависимость времени инкубационного периода от величины приложенных напряжений  $\tau_{\text{инк}}(\sigma)$  имеет обычный монотонно слабо спадающий характер, обусловленный слабым влиянием механических напряжений на скорость электрохимической коррозии. Зависимость времени дорастания трещины до критического размера от величины растягивающих напряжений  $\tau_5(\sigma)$  имеет немонотонный трехстадийный характер (рис. 1). На первой стадии, при напряжениях меньше предела макроупругости ( $\sigma < \sigma_0$ ), наблюдается монотонное уменьшение  $\tau_5$ ; на второй стадии, в сравнительно узком интервале напряжений от предела макроупругости до предела текучести, наблюдается резкое увеличение  $\tau_5$ . При дальнейшем увеличении напряжений ( $\sigma > \sigma_T$ ) вновь наблюдается монотонное уменьшение времени дорастания трещины  $\tau_5$  с увеличением прикладываемых напряжений.

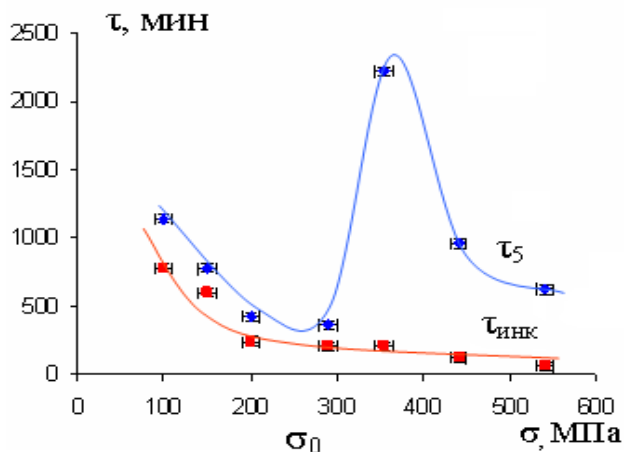


рис. 1. Зависимость времени инкубационного периода ( $\tau_{\text{инк}}$ ) и времени дорастания трещины до критического размера ( $\tau_5$ ) от величины приложенных напряжений стали 10Г2ФБ в исходном состоянии

Для объяснения наблюдаемых закономерностей в работе предложена качественная модель распространения коррозионной трещины в тонких образцах трубных сталей. В рамках предложенной модели предполагается, что характерное время  $\tau_5$  - это время дорастания трещины от начального «зародышевого» размера сопоставимого с размером зерна, до размера  $\sim 0.1$  мм, фиксируемого при помощи инструментального микроскопа. Параметр  $\tau_5$  определяется скоростью роста трещины, которая существенно зависит от величины приложенного напряжения и характера процессов пластической деформации, протекающих в вершине трещины.

В рамках модели пластического роста трещины скорость  $V_{\text{тр}}$  может быть связана со скоростью пластической деформации  $\dot{\epsilon}$  простым соотношением:

$$V_{\text{тр}} = l \dot{\epsilon}, \quad (1)$$

где  $l$  – длина трещины.

Скорость пластической деформации в случае движения дислокаций в поле равномерно распределенных точечных препятствий может быть представлена в виде: [1]

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}_0 \exp\left(-\frac{\Delta F}{kT} \left(1 - \frac{\sigma - \sigma_0}{\sigma^*}\right)\right), \quad (2)$$

где  $\sigma^*$  - напряжение течения материала при  $T = 0^0$  К;  $\Delta F/kT$  – энергия активации пластической деформации.

Поле напряжений вблизи вершины трещины может быть представлено выражением: [2]

$$\sigma_{\text{тр}} = 2\sigma \sqrt{\frac{l}{R^*}}, \quad (3)$$

где  $R^*$  - радиус закругления трещины.

В соответствии с [2] величина  $R^*$  может быть представлена в виде суммы физического радиуса закругления трещины  $R$  (определяемого металлографическими методами) и размера пластической зоны  $R_1$  в вершине трещины. Размер пластической зоны  $R_1$  определяется уровнем внешних и внутренних напряжений, существенно зависящих от параметров структуры металла.

В области упругих деформаций ( $\sigma < \sigma_0$ ) уменьшение  $\tau_5$  с ростом растягивающих напряжений связано с увеличением скорости движения трещины при увеличении механического напряжения (см. уравнения (1)-(2)). На второй стадии, в области напряжений выше предела макроупругости, в образце интенсивно протекают процессы микропластической деформации приводящие к увеличению радиуса закругления трещины (см. (3)) и, как следствие, к замедлению роста трещины. При значениях напряжений сопоставимых с пределом текучести весь объем образца оказывается пластически продеформированным (размер пластической зоны в вершине трещины становится сопоставимым с толщиной образца), в связи с чем вновь становится доминирующим вклад связанный с увеличением скорости движения трещины обусловленный увеличением растягивающих механических напряжений.

Список публикаций:

[1] Эшби М.Ф., Фрост Г., *Карты механизмов деформации/ Перевод с английского Берштейна Л.М. – Челябинск: Металлургия. 1989.*

[2] Гольдштейн М.И., Литвинов В.С., Бронфин Б.М. *Металлофизика высокопрочных сплавов. М.:Металлургия, 1986*

## **Экспериментальное исследования распространения трещин в трубных сталях при коррозионно-усталостных испытаниях**

**Бутусова Елена Николаевна**

*Котков Дмитрий Николаевич, Нохрин Алексей Владимирович, Чувильдеев Владимир Николаевич*

*Научно исследовательский физико-технический институт ННГУ им. Н.И.Лобачевского*

*Чувильдеев Владимир Николаевич, д.ф.-м.н.*

*[Anelka13@yandex.ru](mailto:Anelka13@yandex.ru)*

В настоящее время проблема исследования механизмов зарождения и распространения коррозионных трещин является одной из актуальных задач физического материаловедения. Следует отметить, что в литературе отсутствуют теоретические модели, позволяющие связывать параметры микроструктуры стали с параметрами ее коррозионно-усталостной прочности, а также систематические экспериментальные исследования, посвященные этой проблеме. В связи с этим целью настоящей работы является проведение исследований влияния структуры материала на параметры его коррозионно-усталостной прочности.

В качестве объектов исследования выступали трубные стали марок 10Г2ФБ и 17Г1С-У, находившиеся в различных структурных состояниях. Исследование коррозионной усталости проводилось по схеме “консольный изгиб” на образцах 7.5×10×60 мм с V-образным надрезом глубиной 0.5 мм и радиусом закругления 0.25 мм. В качестве рабочей среды использовался 3%-ный водный раствор NaCl. Испытания проводились в интервале амплитуд напряжений до предела текучести. В ходе эксперимента металлографическими методами фиксировалась зависимость средней длины трещины от числа циклов нагружения  $L(N)$  при различных амплитудах напряжений ( $\sigma_a$ ). На основе полученных экспериментальных зависимостей рассчитывались зависимости средней скорости роста трещины от величины напряжения в вершине трещины  $V_{тр}(\sigma)$  для сталей в различных структурных состояниях. Было показано, что скорость роста трещины в состаренных сталях оказывается выше, чем в состоянии поставки при одних и тех же уровнях напряжений.

Для объяснения наблюдаемой зависимости  $V_{тр}(\sigma)$  в работе предложена модель распространения трещины, основанная на современных представлениях физики металлов и механики сплошных сред.

В рамках предложенной модели предполагается, что скорость роста коррозионно-усталостной трещины ( $V_{тр}$ ) контролируется скоростью пластической деформации в ее вершине ( $\dot{\epsilon}$ ). Такая связь может быть установлена с помощью модели пластического роста дефекта ( $\dot{l} \sim \dot{\epsilon} \cdot \epsilon$ ) [2]. Зависимость скорости пластической деформации от величины приложенных напряжений описывается соотношением Орована для случая движения дислокации в поле равномерно расположенных точечных дефектов

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}_0 \exp[-\Delta F / kT \cdot (1 - \sigma / \tau)] \quad (3)$$

где  $\Delta F$  - общая свободная энергия (энергия активации), необходимая для того, чтобы преодолеть препятствие без приложения внешнего напряжения,  $\tau$  – напряжение течения твердого тела при  $T=0K$ .

На основе разработанной модели была проведена оценка величины энергии активации  $\Delta F$  для сталей в различных структурных состояниях. Сопоставление рассчитанных значений  $\Delta F$  с табличными [3] позволило установить, что основным типом препятствий, контролирующих скорость пластической деформации в сталях в

состоянии поставки являются атомы легирующего элемента (углерода), равномерно распределенные в зернах феррита ( $\Delta F_1 \sim 7-9 \text{ kT}_m$ ). Величина  $\Delta F$  для состаренных сталей ( $\Delta F_1 \sim 2-3 \text{ kT}_m$ ) близка к энергии активации для случая движения дислокаций, огибающих некогерентные частицы структурно сводного цементита.

Список публикаций:

1. Разрушение, т.3 Инженерные основы и воздействие внешней среды./ Под редакцией Г.Либовиц. – М.: Мир, 1976.

2. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. – М.: Атомиздат, 1972.

Эшби М.Ф., Фрост Г., Карты механизмов деформации/ Перевод с английского Берштейна Л.М. – Челябинск: Металлургия, 1989

## **Определение изменения структуры и механических свойств медных проводов при нагреве**

**Вдовенко Анна Александровна**

**Буланакова Лариса Николаевна**

*Кемеровский государственный университет*

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

*[kissanna86@mail.ru](mailto:kissanna86@mail.ru)*

Обработка методов исследования электротехнических объектов при экспертизе пожаров необходима для установления причин возгорания и очага пожара. Любое находящееся под напряжением электротехническое устройство является потенциальным источником зажигания, вклад электроустановок и электросетей в возникновение пожаров довольно значителен. Наиболее информативным методом исследования причин разрушения и повреждения электротехнических проводов является металлографический анализ, позволяющий получать информацию о причинах разрушения токопроводящей жилы. Для анализа причин разрушения электропроводки необходима информация об изменении структуры и механических свойств проводов при линейном нагреве.

С этой целью были отобраны медные провода различного диаметра ( $d_1 = 3,5 \text{ мм}$ ,  $d_2 = 2,25 \text{ мм}$ ,  $d_3 = 2,15 \text{ мм}$ ) марки ПВ1 ГОСТ 6323-79 длиной по 2,5 см. Каждый образец был нагрет до температуры  $300 \text{ }^\circ\text{C}$  и охлажден на воздухе при комнатной температуре. Затем они помещались в алюминиевый тонкостенный цилиндр высотой 1,5 см и диаметром 3 см, заливались эпоксидной смолой. После затвердевания эпоксидной смолы была произведена абразивная подготовка шлифов и полировка. Обработка производилась в несколько стадий. Для грубой подготовки шлифов использовались наждачные бумаги. Дальнейшая обработка проводилась пастами «гои» до исчезновения царапин и рисок. Подготовленные образцы исследовались с использованием оптического микроскопа.

Для исследования изменений механических свойств медных проводов была измерена микротвердость исходных и нагретых образцов методом Виккерса на микротвердомере ПМТ-3М. При этом в образец вдавливалась алмазная четырехгранная пирамидка под действием нагрузки  $P$ , приложенной в течение определенного времени. Далее проводилось измерение диагоналей отпечатка  $d_1$  и  $d_2$ , оставшегося на поверхности шлифа после снятия нагрузки. Измерение микротвердости образцов проводилось 10 раз для усреднения результата.

Значение микротвердости рассчитывалось по формуле:

$$H = 1,854 * \frac{P}{d^2}$$

где  $d$  равняется  $d_{1,2} = d_{1,2} * 0,000312$ ,  $P$  – нормальная нагрузка, приложенная к алмазному наконечнику (100 гр.).

Результаты измерений приведены ниже (рис.1).



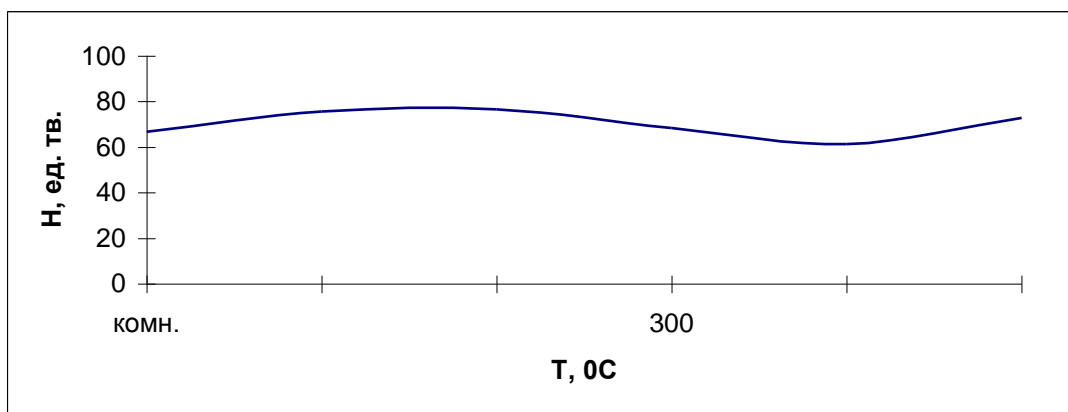


рис.1. Зависимость микротвердости меди от температуры нагрева

Далее для исследования структуры медных проводов образцы были протравлены раствором аммиака (20%) с добавлением перекиси водорода в соотношении 5:1. Процесс травления контролировался с помощью оптического микроскопа. Микроструктура образцов после травления представлена ниже (рис. 2,3).



рис.2. Микроструктура исходного медного провода  $d=3,5$  мм, увеличение  $\times 500$

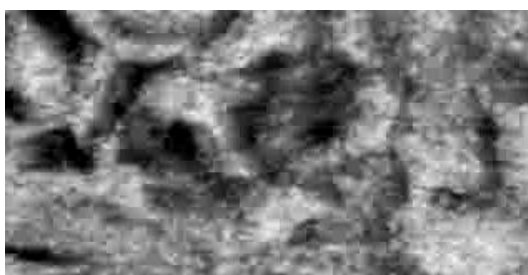


рис.3. Микроструктура медного провода  $d=3,5$  мм, нагретого до  $T = 300^{\circ}\text{C}$ , увеличение  $\times 500$

Полученные данные позволяют сделать вывод о том, что при нагревании до  $300^{\circ}\text{C}$  наблюдается изменение структуры и появление крупных зёрен (рис. 2,3). Изменений механических свойств при нагревании образцов не происходит, независимо от диаметра образца. Полученные данные могут быть использованы при диагностике условий внешних воздействий на провода.

## Высокотемпературные *in situ* исследования термостабилизации ПАН волокон

*Горичева Анна Викторовна*

*Челябинский государственный университет*

*Тюменцев Василий Александрович, д.х.н.*

*[Gorianna@mail.ru](mailto:Gorianna@mail.ru)*

Углеродные волокна находят практическое применение при разработке перспективных композиционных (в том числе сверхвысокотемпературных) материалов. Такие материалы характеризуются малым удельным весом, высокими упруго-прочностными свойствами и повышенной термостойкостью в области высоких и сверхвысоких температур. Введение высокопрочных и высокомодульных волокон в углеродную матрицу сопровождается повышением прочности и жёсткости изделий. Производство углеродных волокон на основе ПАН включает низкотемпературную окислительную термостабилизацию в воздушной среде и последующую высокотемпературную карбонизацию в инертной атмосфере.

Одним из важнейших технологических этапов производства углеродных волокон является стадия термостабилизации, в процессе которой наряду с реакцией циклизации происходит частичное окисление материала и формирование новой структуры термостабилизированного волокна. В данной работе методом высокотемпературного рентгеноструктурного анализа в процессе постепенного нагрева до 2400С в изометрических условиях *in situ* изучены закономерности преобразований структуры полиакрилонитрила в структуру термостабилизированного волокна.

Исследования выполнены на полиакрилонитрильных волокнах, полученных по диметилформамидной и диметилсульфоксидной технологиям. Исходное волокно наматывали виток к витку на специально изготовленную никелевую пластину. Далее пластину устанавливали в держатель образца, расположенного в центре цилиндрической печи высокотемпературной камеры рентгеновского аппарата дифрактометра ДРОН-3. Скорость подъема температуры образца (1,5 град/мин, 2 град/мин или 3 град/мин) регулировали изменением режима увеличения тока в цепи нагревательных элементов печи высокотемпературной камеры. Фрагменты рентгенограмм ПАН волокна в угловом интервале  $2\theta$  от 12 до 34 градусов записывали в процессе термообработки при температурах от комнатной до 2400С (фильтрованное  $\text{Cu K}\alpha$  излучение). Изотермическую обработку волокна при 2400С проводили до полного завершения структурных преобразований материала.

Установлено, что по мере увеличения температуры материала ПАН нити от ~30 до ~2000С интенсивность дифракционного максимума 100 постепенно увеличивается на 10%. При этом интегральная ширина максимума уменьшается от 0,8 до 0,55 градусов. Затем, в зависимости от режима термообработки волокна, в процессе дальнейшего подъема температуры или изотермической обработки при максимальной температуре наблюдается уменьшение интенсивности максимума. При этом интегральная ширина дифракционного максимума 100 дифракционного максимума постепенно увеличивается до ~2 градусов. В конце процесса термостабилизации максимум 100 полиакрилонитрила сливается с линией фона.

Такое изменение профиля дифракционного максимума 100 в процессе термообработки обусловлено, на первой стадии процесса, некоторым увеличением количества кристаллической фазы и увеличением размеров (совершенствованием структуры) областей когерентного рассеивания. На второй стадии процесса термостабилизации происходит разрушение исходной структуры полиакрилонитрила, которое сопровождается активным уменьшением размеров областей когерентного рассеивания.

Установлено также, что при самой медленной (1,5 град/мин) скорости подъема температуры количество кристаллической фазы в материале ПАН нити практически не меняется не только во время подъема температуры, но и в процессе изотермической выдержки при 2400С в течение ~2 часов. Фазовый переход «кристаллический полиакрилонитрил – промежуточная структура углеродного волокна» происходит на более поздних стадиях термообработки.

В ПАН волокнах, полученных по диметилформамидной технологии, процесс структурных преобразований материала начинается на более ранних стадиях термообработки по сравнению с аналогичным процессом в волокнах, полученных по диметилсульфоксидной технологии.

Таким образом, технология получения исходного ПАН волокна и режим подъема температуры волокна в процессе термостабилизации существенно влияют на температурный интервал начала и завершения фазового перехода «кристаллический полиакрилонитрил – промежуточная структура углеродного волокна».

## **Интерпретация наблюдаемого массопереноса в металлах при высокоинтенсивном воздействии импульсно-периодическим пучком заряженных частиц**

*Грекова Татьяна Сергеевна*

*Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского*

*Вершинин Георгий Анатольевич*

*[vershinin@phys.omsu.omskreg.ru](mailto:vershinin@phys.omsu.omskreg.ru)*

В работах [1-2] при экспериментальном исследовании микроструктуры, элементного состава и формирования наноразмерных интерметаллидных фаз в поверхностных слоях поликристаллического никеля и титана, имплантированных, соответственно, пучками ионов титана и алюминия на вакуумно-дуговом источнике ускоренных ионов «Радуга-5», установлена аномально большая глубина внедрения легируемой примеси. В литературе отсутствует однозначная интерпретация такого усиленного массопереноса на большие глубины. Поэтому выявление основных механизмов и интерпретация наблюдаемых закономерностей массопереноса на аномально большие глубины при облучении металлических материалов высокоинтенсивным ионным пучком является актуальной задачей.

Отличительной особенностью источника «Радуга-5» является возможность непрерывного или импульсно-периодического формирования монохроматического пучка ионов с энергией до 120 кэВ и током до 2А, что позволяет с высокой скоростью набирать дозы имплантируемых металлических ионов, разогревать мишень ионным пучком до необходимой температуры и, тем самым, модифицировать слои толщиной до нескольких микрон. Элементный анализ облученных при различных режимах алюминия титановых образцов показал [2], что на поверхности облучаемого материала формируется со средней скоростью ~3,5 нм/мин оксидно-карбидная пленка, содержащая до 40% ат. алюминия, а концентрация титана в ней близка к нулю. Что касается имплантации никеля ионами титана, то здесь наблюдается интенсивная миграция атомов никеля в осаждаемую пленку, скорость роста которой зависит от режимов (дозы) облучения и варьируется в пределах от 3 до 8 нм/мин. Поэтому можно предположить, что глубинные концентрационные профили алюминия и титана с широким максимумом у поверхности формируются в течение первых 8-10 мин облучения. На результирующий профиль на этом этапе оказывают влияние, по-видимому, такие процессы, как распыление поверхности, радиационно-стимулированная диффузия, ионное перемешивание. При дальнейшем увеличении времени облучения ионы со средней энергией 40 кэВ не могут пройти сквозь нарастающую пленку, трансформация профиля происходит за счет проникновения лишь высокоэнергетической доли ионов пучка, имплантации атомами отдачи, термодиффузии и термодиффузионных эффектов, чему способствует высокая температура мишени. Для описания на первоначальном отрезке времени концентрационных профилей при полиэнергетической имплантации предложена модель [3], в которой профиль внедренной примеси представляется в виде интеграла по энергии от произведения двух функций, одна из которых  $g(E)$  описывает распределение ионов по энергии в пучке, а вторая  $n_0(x,E)$  описывает профиль внедрения ионов моноэнергетическим пучком с энергией  $E$ :

$$n(x) = \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} g(E)n_0(x,E)dE.$$

В качестве профиля  $n_0(x,E,t)$  можно использовать функцию Гаусса, Пирсона или решение уравнения радиационно-стимулированной диффузии с учетом распыления поверхности мишени. Последний вариант из перечисленного позволяет в конечном итоге получить лучшее согласие предсказываемых результатов с наблюдаемыми, если энергетическое распределение частиц в пучке описывать функцией Гаусса. Сформированный таким образом модельный профиль выступает в качестве начальной функции для уравнения термодиффузии, используемого для прогнозирования окончательно наблюдаемого концентрационного профиля с заданной дозой облучения. В рамках представленного алгоритма удается объяснить аномально глубокое проникновение в металлах имплантируемых атомов источника «Радуга-5».

Список публикаций:

- [1] Шаркеев Ю. П., Рябчиков А.И., Козлов Э.В. и др. // *Изв. вузов. Физика*. 2004. № 9. С. 44-52.  
 [2] Курзина И. А., Божко И. А., Калашиков М. П. и др. // *Металлофизика. Новейшие технологии*. 2004. Т. 26. № 12. С. 1645-1660.  
 [3] Вершинин Г.А., Геринг Г.И., Грекова Т.С. // *Изв. вузов. Физика*. 2007. № 10/3. С. 60-63.

## Ближний порядок в крупнозернистом и нанокристаллическом нихrome

*Дудова Надежда Рузиевна*

*Институт проблем сверхпластичности металлов РАН*

*Валитов Венер Анварович, к.т.н.*

*[nadya\\_019@mail.ru](mailto:nadya_019@mail.ru)*

Явление ближнего упорядочения возникает вследствие увеличения числа связей между разноименными атомами в твердых растворах. Оно вносит дополнительный вклад в упрочнение твердых растворов. Известно, что в никелевых сплавах ближний порядок по типу  $Ni_2Cr$  наблюдается при содержании >16-20% Cr (по массе). Это явление приводит к существенному изменению физико-механических свойств сплавов [1]. Например, известно о том, что в нихrome X20H80, являющемся основой жаропрочных никелевых сплавов, в определенном интервале температур аномально увеличиваются прочностные характеристики. Однако проводилось исследование механических свойств только крупнозернистого (КЗ) ( $d \sim 100$  мкм) или микрокристаллического ( $d \sim 5-10$  мкм) нихрома [2]. О том, как влияет измельчение структуры до нанокристаллического (НК) состояния на поведение механических свойств нихрома, данных нет.

Целью данной работы явилось исследование особенностей аномального поведения прочностных свойств, связанных с возникновением ближнего порядка, в нихrome X20H80 с КЗ и НК структурами.

Химический состав исследуемого сплава 75%Ni–21%Cr–0.6%Si–0.3%Mn–0.7%Fe–0.2%Al–0.05%С. Механические испытания стандартных образцов КЗ нихрома ( $d=100$  мкм) по схеме осевого сжатия проводились

в интервале температур 300-700°C и скоростей деформации  $10^{-5}$ - $10^{-3}$  с<sup>-1</sup>. Результаты показали, что аномальная позитивная температурная зависимость напряжения течения  $\sigma_{20}$  КЗ нихрома наблюдается в интервале T=400-500°C при скорости деформации  $\dot{\epsilon}=10^{-5}$  с<sup>-1</sup> и T=450-600°C при  $\dot{\epsilon}=10^{-3}$  с<sup>-1</sup>. Также было обнаружено, что КЗ нихром при температурах 300-600°C демонстрирует неустойчивое прерывистое течение, т.е. наблюдается зубчатость кривой  $\sigma$ - $\epsilon$ . При анализе температурной зависимости критической степени деформации  $\epsilon_{кр}$ , при которой начинается прерывистое течение сплава, были выявлены участки "обратного" поведения, в которых  $\epsilon_{кр}$  аномально увеличивается с повышением температуры деформации. Причем, области "обратного" поведения находятся в пределах T=350-450°C, но смещаются в сторону более высоких температур с увеличением скорости деформации, и соответствуют 350-400°C для  $\dot{\epsilon}=10^{-5}$  с<sup>-1</sup> и 400-450°C для  $\dot{\epsilon}=10^{-3}$  с<sup>-1</sup>.

Температурный интервал аномального поведения  $\sigma_{20}$  и  $\epsilon_{кр}$ , что вызвано ближним упорядочением в исследуемом нихроме с КЗ структурой, находится в соответствии с литературными данными. Кроме того, дополнительно было обнаружено, что при увеличении скорости деформации КЗ нихрома наблюдается тенденция к смещению температурного интервала аномальных участков возникновения ближнего порядка в сторону более высоких значений – от 350-400°C до 450-600°C.

Для изучения свойств НК состояния использовали НК нихром, полученный методом интенсивной пластической деформации ( $\epsilon=6.5$ ) кручением дисков с исходной КЗ структурой под высоким квазигидростатическим давлением 6 ГПа при комнатной температуре. Средний размер зерен составлял 50 нм. О прочностных характеристиках НК нихрома судили по его микротвердости после отжига в интервале температур 100-600°C. Было установлено, что НК нихром обладает микротвердостью 4.6 ГПа, что в 4 раза превышает микротвердость КЗ сплава. После отжига в течение 1 часа при T=100-600°C микротвердость монотонно уменьшается с увеличением температуры отжига, за исключением температурного участка 400-500°C, где она аномально увеличивается до значений 5.4 ГПа.

Для уточнения причины выявленного аномального упрочнения НК нихрома были проведены электронно-микроскопические исследования и рентгеноструктурный анализ. Было установлено, что сильно неравновесное состояние НК структуры нихрома при нагреве вплоть до T=500°C претерпевает лишь процессы возврата, в частности, происходит перераспределение и аннигиляция дислокаций, что приводит к снижению уровня внутренних микронапряжений с 0.33% до 0.07%. Размер зерен после отжига лишь незначительно увеличивается до 80 нм. Вышеприведенные результаты свидетельствуют о том, что на фоне увеличения степени равновесности НК структуры при нагреве T=100-500°C аномальное повышение микротвердости в интервале 400-500°C вызвано, по-видимому, образованием ближнего порядка.

Таким образом, сравнительный анализ аномального упрочнения нихрома в КЗ и НК состояниях свидетельствует о том, что в НК нихроме также происходит образование областей локального порядка при тех же температурах 400-500°C, что и в КЗ нихроме.

Список публикаций:

[1] Колотушкин В.П., Кондратьев В.П., Лаушкин А.В., Речицкий В.Н // *МиТОМ*. 2003. № 11. С. 7-10.

[2] Имаев М.Ф. // *Дисс. ... канд. физ. – мат. наук. Москва. 1989. 141с.*

## **Формирование ультрадисперсной структуры в малоуглеродистых сталях при интенсивной пластической деформации**

**Закирова Альбина Азалитовна**

*Институт проблем сверхпластичности Российской академии наук  
Уфимский государственный авиационный технический университет*

*Зарипова Руда Гарифьяновна*

*[karabaka02@mail.ru](mailto:karabaka02@mail.ru)*

Сегодня одним из наиболее приоритетных направлений научных исследований являются перспективные нанотехнологии и наноматериалы. В связи с этим актуальным направлением современного материаловедения становится разработка технологий для получения объемных заготовок металлов и сплавов с ультрадисперсной структурой. Использование методов интенсивной пластической деформации (ИПД) путем измельчения структурных составляющих металлов и их сплавов позволяет формировать новый уровень технологических и эксплуатационных характеристик в традиционных конструкционных материалах, что открывает новые перспективы их использования.

В настоящей работе было проведено сравнение двух способов ИПД: с использованием всестороннейковки (рис.1, а) и посредством кручения (ИПДК) под высоким давлением (рис.2, б). Первым способом получают достаточно объемные заготовки с измельченной структурой, в то время как при ИПДК достигаются очень большие степени деформации для получения предельных нанокристаллических (НК) состояний металлов и сплавов.

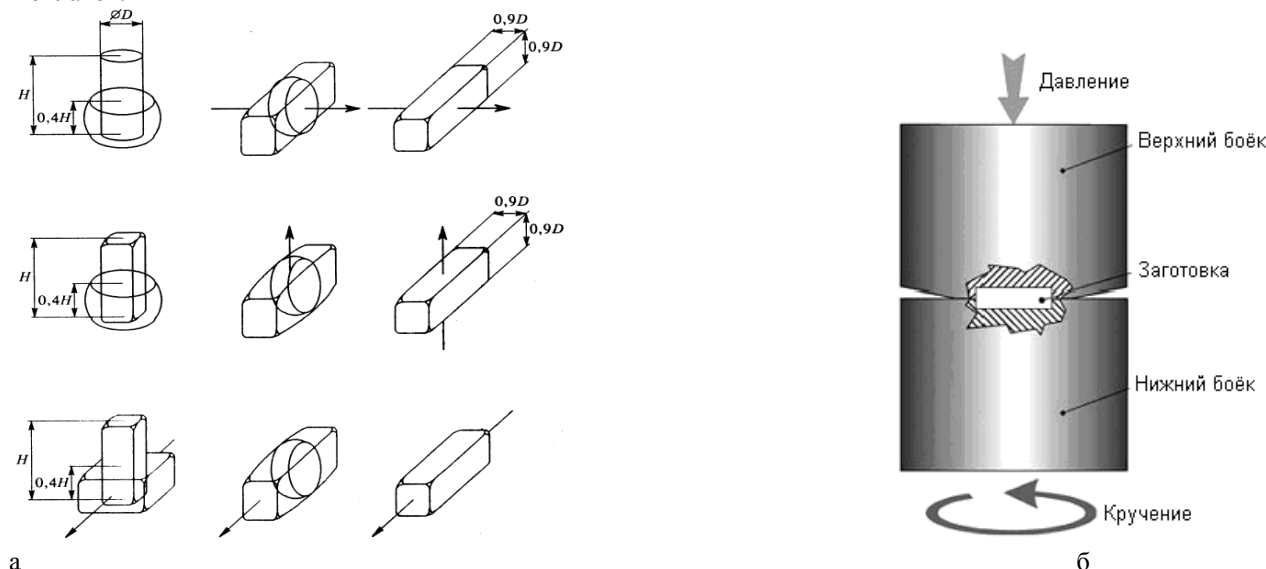


рис.1. Принципиальные схемы ИПД: а – всесторонняя ковка; б – кручение под высоким давлением

Исследования проводились на идентичных малоуглеродистых промышленных сталях: стали 20 и стали 3, стандартного химического состава.

Формирование ультрадисперсной структуры изучалось на разных уровнях: микроструктурном (методом оптической микроскопии) и путем исследования тонкой структуры (метод просвечивающей электронной микроскопии). Влияние ИПД на механические свойства оценивалось методами измерения микротвердости и твердости.

Выявлены принципиальные отличия в эволюции структуры сталей в зависимости от способа измельчения структуры. Проанализировано изменение механических свойств сталей после ИПД.

Работа выполнена в рамках предконтрактных работ и по государственному контракту (№02.513.11.3196).

Список публикаций:

- [1] Закирова А. А., Салицев Г. А., Зарипова Р. Г., Сеньков О. Н., Чистякова Ю. В. // Характеристика углеродистой стали с СМК структурой. - Структура и свойства нанокристаллических материалов. [Сб. науч. тр.]. Екатеринбург: УрО РАН, 1999. С. 123-130.
- [2] Закирова А. А., Салицев Г. А., Зарипова Р. Г. // Формирование СМК структуры в сталях при ИПД. Материалы Республиканской научно-технической конференции «Техника на пороге XXI века» г. Уфа, 21 декабря 1999. С. 140.
- [3] Закирова А. А., Салицев Г. А., Зарипова Р. Г. // Формирование СМК структуры в нержавеющих сталях в ходе интенсивной пластической деформации, [Сб. науч. тр.] V Всероссийской конференции «Физикохимия ультрадисперсных систем», 9-14 октября 2000 г. / Екатеринбург, УрО РАН, 2001. С. 174-181.

## Ультразвуковая обработка сварных соединений низкоуглеродистых сталей

**Захаревич Елена Евгеньевна**

**Плотникова Наталья Владимировна**

**Новосибирский государственный технический университет**

**Батаев Анатолий Андреевич**

**[zaharevich81@mail.ru](mailto:zaharevich81@mail.ru)**

В настоящее время основным способом соединения сложных и ответственных металлоконструкций и изделий является сварка. Характерной особенностью и отрицательной характеристикой сварных соединений, полученных сваркой плавлением, является структурная неоднородность по сечению. Сварное соединение можно условно разделить на три зоны: зона сварного шва, зоны термического влияния и основной металл. Все эти зоны отличаются друг от друга не только структурными составляющими, но и механическими свойствами.

Не смотря на то, что сварной шов и зоны термического влияния прочнее основного металла, эти области так же обладают повышенной хрупкостью.

Одной из наиболее важных задач является задача повышения комплекса механических свойств сварных соединений из углеродистых и низколегированных сталей, за счет достижения ими механических свойств, сравнимых со свойствами основного металла. Анализ литературных данных показал, что на сегодняшний день предложено большое количество методов, которые позволяют управлять отдельными свойствами сварных соединений [1]. В качестве поверхностной пластической обработки сварных соединений авторы применяют ударный ультразвуковой инструмент, что не обеспечивает надлежащего качества поверхности [2]. Нами предложен способ повышения надежности сварных соединений с помощью ультразвуковой выглаживающей обработки.

В качестве материала исследований использовали сталь 20. Листы толщиной 3 мм без разделки кромок соединяли встык с помощью ручной дуговой сварки (РДС) с двух сторон. Ручная электродуговая сварка осуществлялась на переменном токе электродом УОНИИ 13/55, диаметр которого составлял 3 мм.

Ультразвуковая обработка (УЗО) заключалась в пластическом деформировании сварного шва, зон термического влияния и основного металла. Ультразвуковую обработку производили сферическим твердосплавным индентором с радиусом закругления 4 мм. При обработке частота колебаний составляла 22 кГц. Амплитуда колебаний индентора была равной 20 мкм. Прижимающая нормальная сила составляла 29,4 и 98 Н. Подача составляла 0,3 м/мин при шаге между дорожками 0,1 мм.

В данной работе в качестве показателей, характеризующих сопротивление развитию усталостных трещин, использовали параметры, которые определяются при построении кинетических диаграмм усталостного разрушения (КДУР). Основным показателем для сравнения в данном исследовании выбран угол наклона КДУР к оси абсцисс, который характеризует скорость распространения трещины.

На рисунке 1 представлены КДУР стали 20. Распределение кривых свидетельствует о незначительном снижении усталостной трещиностойкости сварных швов, полученных ручной дуговой сваркой. Последующая ультразвуковая обработка приводит к тому, что материал эффективнее сопротивляется образованию трещины.

Снижение усталостной трещиностойкости после сварки стали 20 объясняется тем, что при относительно быстром охлаждении крупнозернистый аустенит в зоне сварного шва распадается с образованием видманштеттовой структуры, с определенной ориентацией ферритных пластин. Как известно, наличие видманштеттова феррита (рис. 2) нежелательно, так как сталь с такой структурой при невысокой твердости достаточно хрупка и малопластичная [3]. При нагружении сварных соединений разрушение часто происходит именно по этим зонам.

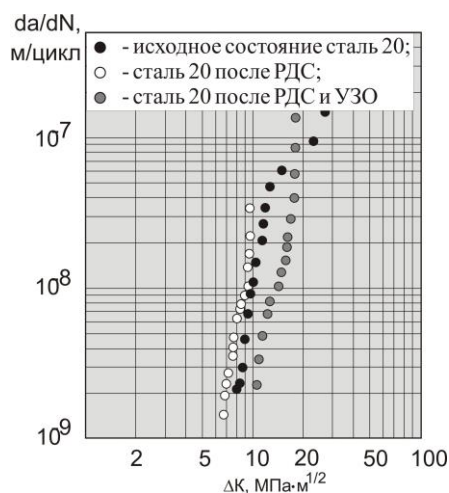


рис. 1. Влияние ультразвуковой обработки на КДУР стали 20



рис. 2. Структура сварного шва

Ультразвуковая обработка сварных соединений приводит к увеличению значений циклической трещиностойкости, что обусловлено возникновением остаточных сжимающих напряжений в упрочненном поверхностном слое. Данные напряжения создают условия, способствующие тому, что распространение трещины начинается значительно позднее, чем в материале с исходной структурой. В тоже время скорость распространения трещины в упрочненном ультразвуковой обработкой материале сравнима со скоростью распространения трещины в сварных швах, что можно объяснить небольшой глубиной упрочненного слоя (~ 200 мкм).

Исследование свойств стали 20, подвергнутой сварке и последующей ультразвуковой обработке показало, что ультразвуковая обработка является эффективным способом повышения характеристик усталостной трещиностойкости сварного шва после поверхностной пластической деформации по сравнению с характеристиками необработанных сварных швов.

Список публикаций:

[1] Абрамов О. В., Артемьев В. В. и др. // *Материаловедение*, 2001. № 6. С. 39 - 45.

[2] Безбородов В. П., Клименов В. А. и др. // *Сварочное производство*. 2000. № 7. С.17 - 21.

[3] Лившиц Б. Г. // *Металлография. Учебник для вузов.* – М.: Изд-во *Металлургия*.1990. С. 236.

## Поиск новых индий- и галлийпроводящих твердых электролитов

*Зяблицева Екатерина Владимировна*

*Данилов Денис Николаевич*

*Вятский государственный университет*

*Леушина Аделаида Пантелеевна, к.х.н.*

*[amel@mail.ru](mailto:amel@mail.ru)*

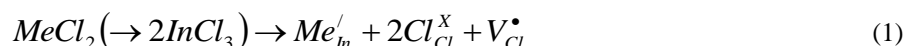
При современном уровне развития науки и техники являются востребованными твердые электролиты (ТЭ) с проводимостью по ионам различных металлов. В настоящее время ТЭ с проводимостью по индию и галлию не известны, поэтому их создание является актуальной задачей.

Для создания ТЭ с обратимостью по многозарядным катионам ( $In^{3+}$ ,  $Ga^{3+}$ ) используют квазибинарные солевые системы с примесной проводимостью в области твердых растворов (ТР).

В качестве предполагаемого ТЭ с проводимостью по индию были предложены системы типа  $InCl_3 \div MeCl_2$ , где Me – Mg, Co, Cd, Mn, Sn, Zn, Ni . При этом  $InCl_3$  является базисным соединением, а  $MeCl_2$  – легирующей добавкой.

В соответствии с литературными данными, во всех этих системах образуются ограниченные эвтектические твердые растворы на основе  $InCl_3$ .

При легировании в системе возможно протекание квазихимической реакции:

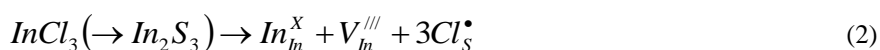


В этом случае образуются анионные вакансии, что свидетельствует о возможности проводимости по аниону.

В области оптимальных составов были получены значения чисел переноса:

Легирующая добавка	Область существования ТР, мол. %	Область оптимальных составов, мол. %	Числа переноса ионов в области оптимальных составов
MgCl <sub>2</sub>	3,0-30,0	10,0-30,0	0,6-0,7
CoCl <sub>2</sub>	5,0-20,0	13,0-16,0	0,6-0,9
CdCl <sub>2</sub>	0,5-5,0	1,0-2,0	0,6-1,0
MnCl <sub>2</sub>	1,0-4,0	2,5-3,5	0,5-0,9
SnCl <sub>2</sub>	1,0-10,0	2,0-5,0	0,4-,07
ZnCl <sub>2</sub>	0,5-18,0	12,0-16,0	0,3-0,6

Рассматривалась также система  $In_2S_3 \div InCl_3$ , где  $In_2S_3$  – базисное соединение, а  $InCl_3$  – легирующая добавка. В этой системе возможно образование вакансий в катионной подрешетке, что способствует проводимости по индию:



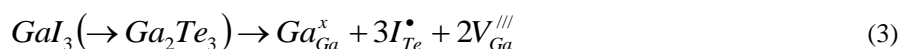
Базисное соединение  $\text{In}_2\text{S}_3$  является полупроводниковым материалом, но при легировании электронная составляющая понижается за счет взаимодействия положительно заряженных примесных дефектов с электронами.

ТЭ, содержащий 3,0-7,0 мол.% легирующей добавки, обладает близкими к 1 среднеионными числами переноса. Диаграмма плавкости данной системы не изучена и область ТР не определена. По зависимости электропроводности от состава можно предположить, что в системе образуется ТР с границей примерно при 10 мол.% легирующей добавки. Это косвенно подтверждают измерения методом РФА по изменению параметров кристаллической решетки.

С данным ТЭ возможно термодинамическое исследование индий содержащих систем. Но при исследовании  $\text{In}_2\text{S}_3$  наблюдалась самодиффузия серы, что искажало результаты измерений, поэтому исследования  $\text{In}_2\text{S}_3$  рекомендуется проводить с использованием двух ТЭ:  $\text{In}_2\text{S}_3 \div \text{InCl}_3$  и в качестве ионоселективной не пропускающей сульфид ион мембраны  $\text{InCl}_3 \div \text{CdCl}_2$ .

Для получения ТЭ с проводимостью по галлию были предложены системы  $\text{PbI}_2 \div \text{GaI}_3$ ,  $\text{GaTe} \div \text{GaI}_3$ ,  $\text{Ga}_2\text{Te}_3 \div \text{GaI}_3$ ,  $\text{GaSe} \div \text{GaI}_3$  и  $\text{Ga}_2(\text{SO}_4)_3 \div \text{Me}_2\text{SO}_4$ , где  $\text{PbI}_2$ ,  $\text{GaTe}$ ,  $\text{Ga}_2\text{Te}_3$ ,  $\text{GaSe}$  и  $\text{Ga}_2(\text{SO}_4)_3$  – базисные соединения, а  $\text{GaI}_3$  и  $\text{Me}_2\text{SO}_4$  – легирующие добавки.

Для систем  $\text{GaTe} \div \text{GaI}_3$ ,  $\text{Ga}_2\text{Te}_3 \div \text{GaI}_3$  и  $\text{GaSe} \div \text{GaI}_3$  в ходе квазихимических реакций возможно образование вакансий по галлию:



А следовательно эта система должна быть обратима по галлию.

В системе  $\text{PbI}_2 \div \text{GaI}_3$  образуются вакансии по йоду, а, следовательно, проводимость должна быть преимущественно анионной. Однако даже невысокие значения чисел переноса ионов галлия позволяет использовать данную систему в качестве ТЭ для термодинамических исследований.

В системе  $\text{Ga}_2(\text{SO}_4)_3 \div \text{Me}_2\text{SO}_4$  в ходе квазихимической реакции предположительно так же не должно образовываться вакансий по галлию. Но вследствие больших геометрических размеров группы  $\text{SO}_4^{2-}$  возможно образование каналов миграции ионов. Поскольку радиус иона галлия сравнительно мал (0,62 Å) геометрических затруднений переноса иона возникнуть не должно.

## Кольцевой фронт горения, реализующийся при синтезе борида вольфрама

*Исаченко Дмитрий Сергеевич*

*Демянюк Дмитрий Георгиевич*

*Томский политехнический университет*

*Долматов Олег Юрьевич*

*[isachenko@k21.phtd.tpu.ru](mailto:isachenko@k21.phtd.tpu.ru)*

Под горением обычно понимают протекание сильно экзотермической химической реакции при температурах, развиваемых в результате саморазогрева вещества [1]. Существует два принципиально отличающихся режима горения: плоский и кольцевой. При плоском режиме горения инициация осуществляется с верхнего торца образца (либо верхнего и нижнего торцов) и самопроизвольно распространяется по образцу сверху вниз с определенной скоростью. При кольцевом режиме горения процесс иницируется с боковой поверхности образца и самопроизвольно распространяется к центру. Характерная особенность – в обоих случаях высокие температуры, при которых протекает реакция, возникают в ходе самой реакции за счет освобождения химической энергии исходной системы и не связаны с подводом энергии извне.

В настоящей работе будет рассмотрен кольцевой режим горения и произведен расчетно-теоретический анализ для системы борида вольфрама. Ранее, в работе [2], уделялось внимание плоскому фронту. Удовлетворительное совпадение численных результатов с результатами приборного эксперимента позволяют расширить исследования. В работе указывается, что для моделирования волны горения используется объемный источник тепловыделения, движущийся с постоянной скоростью, сравнимый со скоростью горения в выбранной системе. Для реализации кольцевого фронта горения необходимо использовать неравномерную сетку, когда толщина фронта горения с каждым слоем увеличивается, но при этом не изменяется объем, занимаемый волной горения (рис. 1).



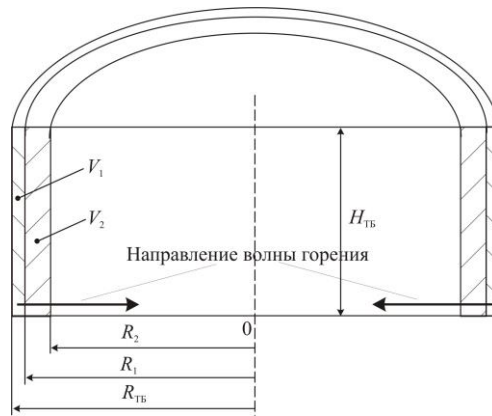


рис. 1. Схема кольцевого горения

Для получения распределения температуры по объему образца во времени, необходимо решить нестационарное двумерное уравнение теплопроводности с подвижным пространственно-распределенным источником тепловыделения:

$$a \cdot \left( \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + \frac{q_v}{C(T)\rho} = \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (1)$$

где  $a$  – коэффициент температуропроводности,  $C(T)$  – теплоемкость,  $\rho$  – плотность образца,  $q_v$  – объемный источник тепловыделения.

На рис. 2 представлено распределение температуры в различные моменты времени в точке, расположенной на половине высоты исследуемого образца. Для получения распределения температуры была смоделирована реакция синтеза образца плотностью 4000 кг/м<sup>3</sup> материала WB. Данный материал представляет интерес в качестве защиты от высокоэнергетичных нейтронов и  $\gamma$ -квантов. Он обладает хорошей замедляющей и поглощающей способностью. При расчетах математической модели использовали экспериментальную и справочную информацию о кинетических и теплофизических параметрах данного состава. В оптимальном исходном составе в качестве исходного продукта горения формируется борид вольфрама. Построенная математическая модель позволяет проводить оценки структурных превращений при СВС-компактировании двухкомпонентных смесей. Модель учитывает компонентный состав смеси, предварительную подготовку смеси: прессование, предварительную температуру подогрева исходной смеси, а также учитывает изменение теплоемкости во времени, зависящей от величины температуры. Исследования показали, что разработанная модель послонного горения с хорошей точностью описывает температурные режимы, позволяет с достаточной точностью предсказывать возможный фазовый состав конечного продукта, анализируя распределение температур в объеме образца.

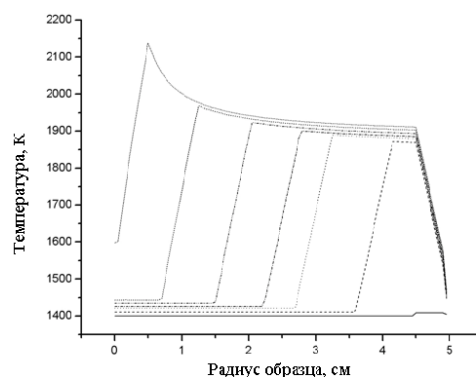


рис. 2. Распределение температуры по радиусу образца в различные моменты времени.

Список публикаций:

- [1] Новиков Н.П., Боровинская Н.П., Мержанов А.Г. Термодинамический анализ реакций самораспространяющегося высокотемпературного синтеза // Процессы горения в химической технологии и металлургии. – Черногловка, 1975. С.174–188..
- [2] Долматов О.Ю., Демянюк Д.Г., Исаченко Д.С., Волжанкин В.В. Определение температурных полей, реализующихся при самораспространяющемся высокотемпературном синтезе борсодержащих материалов // Девятая международная молодежная конференция «Полярное сияние 2006. Ядерное будущее: безопасность, экономика и право»: сборник тезисов докладов. – М.: МИФИ, 2006.

## Изучение реконструкции поверхности кремниевых нановолокон различного вида

Квашнин Александр Геннадьевич

Квашнин Дмитрий Геннадьевич

Сибирский федеральный университет

Сорокин Павел Борисович, к.ф.-м.н.

[cvashnini@g-service.ru](mailto:cvashnini@g-service.ru)

В настоящее время большое количество кремниевых нановолокон (НВ) различных форм и эффективных размеров было синтезировано при высокой температуре. В связи с тем, что атомарная структура НВ в большинстве случаев остается неопределенной, существует большое количество теоретических исследований и предсказаний НВ различных форм и размеров. Так, например, Жао и Якобсон [1] предложили НВ в кристаллографическом направлении  $\langle 110 \rangle$  с пентагональным и гексагональным сечением и показали, что НВ малого размера с таким сечением являются наиболее энергетически выгодными.

С помощью метода классической молекулярной динамики были исследованы кремниевые нановолокна различной формы. Изучена их энергетическая стабильность, ее зависимость от наличия водородного слоя на поверхности нановолокон.

В большинстве теоретических работ исследуются свойства чистых НВ. Однако обычно в эксперименте получают кремниевые нановолокна покрытые кислородом или водородом. Поэтому в данной работе было проведено моделирование свойств НВ  $\langle 110 \rangle$  как с поверхностью пассивированной водородом так и без неё. Нановолокна выращенные в таком направлении были выбраны исходя из экспериментальных фактов, что рост вдоль направления  $\langle 110 \rangle$  должен быть предпочтительней для нановолокон с диаметром менее 25 нм [2].

С помощью метода классической молекулярной динамики, в работе был исследован класс нановолокон с шестиугольным сечением. Предельными случаями структур, принадлежащих этому классу, являются НВ с сечением гексагона (изученные ранее в [1]) и звезды. Была введена классификация таких объектов. В качестве примера на (рис. 1) показаны НВ с сечением звезды (7, 4) (рис. 1(а, б)) и гексагона (4, 4) (рис. 1(в, г)) как покрытые (рис. 1(а, в)) так и не покрытые водородом (рис. 1(б, г)).

Ранее, с помощью квантово-химического метода расчета [2] было проведено численно моделирование геометрии и электронных свойств данных структур. Было показано, что нановолокна типа «звезда» (рис. 1а) являются более выгодными энергетически, чем нановолокна типа «гексагон» (рис. 1в).

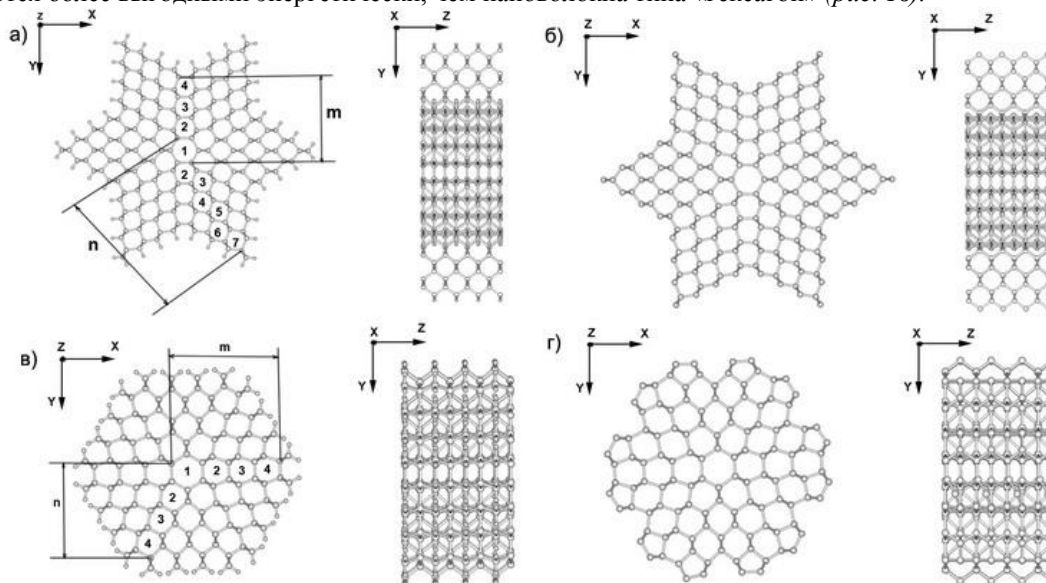


рис. 1. Кремниевые нановолокна с поперечным сечением «звезда» (а, б) (с поверхностью пассивированной и не пассивированной водородом) и «гексагон» (в, г) (с поверхностью пассивированной и не пассивированной водородом).

Однако данный вывод противоречит правилу Вульфа [4], из которого следует, что более выгодной должна быть структура с более гладкой поверхностью (в данном случае, это структура типа «гексагон»). Для исследования этого вопроса, нами были изучены кремниевые НВ (4,4) (с поперечным сечением «гексагон») и (7,4) (с поперечным сечением «шестиконечная звезда») с наличием на поверхности слоем водорода и без него.

Проведенные в данной работе исследования показали, что при отсутствии пассивирующего слоя поверхность структуры реконструируется (рис. 1 (б, в)), а её энергия снижается, делая НВ типа «гексагон» энергетически более выгодным. Таким образом, можно сделать вывод, что запрещение реконструкции поверхности (например, с помощью ее пассивирования) могут привести к искажению реальной ситуации, когда структуры менее выгодные энергетически могут стать более выгодными и наоборот.

Кроме того, было проведено исследование стабильности НВ при различных температурах. Было изучено поведение НВ типа «пентагональная звезда» (7,4) (рис. 1б) и «пентагон» (4,4) (рис. 1в) при  $T = 1000$  К и 1500 К., в течение 100 пикосекунд. На (рис. 2) показано НВ при температуре 1000 К (рис. 2а) и 1500 К (рис. 2б). Видно, что в первом случае существенных изменений в структуре НВ не произошло, кроме небольшой реконструкции поверхности (рис. 2а). При увеличении температуры (1500 К) НВ преобразовывается в цилиндрическую структуру (рис. 2б). Ломанный контур НВ «звезда» предотвращает это и только высокая температура (1500 К) ломает его, преобразовывая контур НВ в плавный, при этом полностью разрушая периодическую структуру волокна. В случае НВ (4,4) уже при температуре 1000 К волокно имеет цилиндрическую структуру, в связи с тем что изначально структура пентагональных волокон близка к цилиндрической (рис. 1г). Для других НВ были получены подобные результаты.

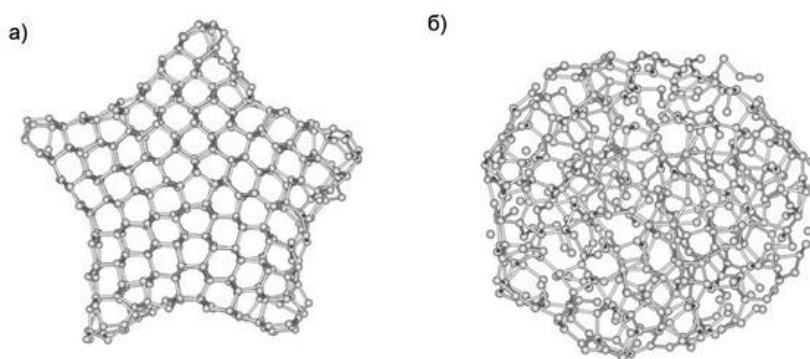


рис. 2. Кремниевые нановолокна с поперечным сечением «звезда» при различных температурах  
а)  $T=1000$ К б)  $T=1500$  К

Список публикаций:

- [1] Y. Zhao, B. Yakobson, What is the Ground-State Structure of the Thinnest Si Nanowires, *Phys. Rev. Lett.*, 91, 035501 (2003)
- [2] V. Schmidt, S. Senz, U. Goesele, Diameter-Dependent Growth Direction of Epitaxial Silicon Nanowires, *Nano Lett.*, 5, 931 (2005)
- [3] П.Б. Сорокин, частное сообщение
- [4] C. Herring, Some Theorems on the Free Energies of Crystal Surfaces, *Physical Review*, 82, 87 (1951)

## Исследование механических свойств SiC нановолокон

**Квашнин Дмитрий Геннадьевич**

**Квашнин Александр Геннадьевич**

**Сибирский федеральный университет**

**Сорокин Павел Борисович, к.ф.-м.н.**

**[cvashnini@gmail.com](mailto:cvashnini@gmail.com)**

Изучены нановолокна состава SiC выращенные в различных кристаллографических направлениях. С помощью метода классической молекулярной динамики рассчитана их геометрия, термическая стабильность и упругие свойства.

SiC наноструктуры представляют особый интерес, в связи с тем, что кристаллическая форма этого соединения играет важную роль в электронике, она имеет такие интересные электрические свойства, как высокая термическая стабильность, большие величины запрещенной зоны и поля пробоя. Таким образом, SiC нановолокна (SiC-НВ) должны иметь подобные свойства, например, быть стабильными при высоких температурах, что позволит применять их в качестве переключателей для электроники высоких мощностей, высоких частот, а также в неблагоприятных условиях окружающей среды.

Нами была изучена геометрическая структура и механические свойства (модуль Юнга) SiC-НВ, выращенных в кристаллографических направлениях  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$  и  $\langle 111 \rangle$  (Рис. 3).

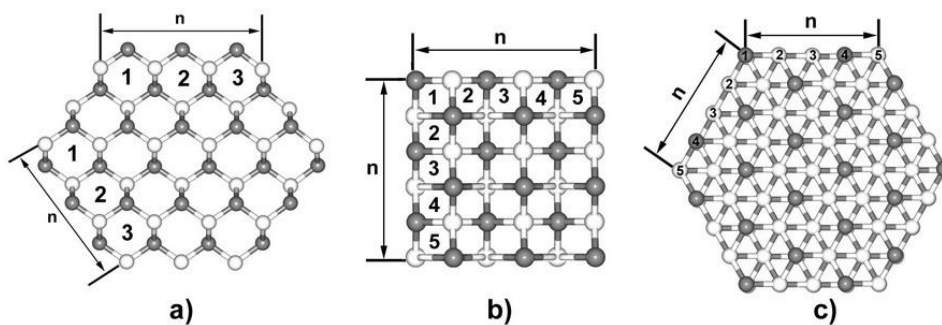


рис. 1 Структуры SiC-НВ выращенные в направлении а)  $\langle 110 \rangle$ , б)  $\langle 100 \rangle$  и в)  $\langle 111 \rangle$ .

В качестве метода расчета нами был использован метод классической молекулярной динамики с потенциалом Терсоффа [6] параметризованный для случая соединения кремния и углерода. Данный потенциал воспроизводит с хорошей точностью структуру и упругие свойства структур состава кремния и углерода.

Ранее, в работе [5] было проведено исследование механических свойств SiC-НВ  $\langle 110 \rangle$ . В частности, было показано, что модуль Юнга таких структур имеет величину  $\sim 5 \times 10^2$  ГПа. Для проверки метода расчета мы провели исследование SiC-НВ  $\langle 110 \rangle$  той же структуры что и исследованной в [5] (рис. 1а) (в классификации предложенной нами - это SiC-НВ (3x3)). Полученный результат находится в хорошем соответствии с данными, приведенными в [5]. Величина модуля Юнга, посчитанного в приведенной работе, составляет  $6.4 \times 10^2$  ГПа, в то время как модуль Юнга, приведенный в [5] равен  $5.3 \times 10^2$  ГПа.

В случае SiC-НВ  $\langle 100 \rangle$  (рис. 1б) были исследованы НВ с индексами (см. классификацию на Рис. 1с) (3x3), (4x4), (5x5), (10x10) и (20x20) (классификация дана на Рис. 1б), был рассчитан модуль Юнга. На (рис. 2) показана зависимость размера элементарной ячейки в периодичном направлении НВ от индекса НВ. Видно, что размер элементарной ячейки с ростом индекса НВ стремится к размеру ячейки кристалла SiC, составляющей 4.31 Å. Аналогичные исследования были проведены для SiC-НВ  $\langle 111 \rangle$ . Был получен подобный результат.

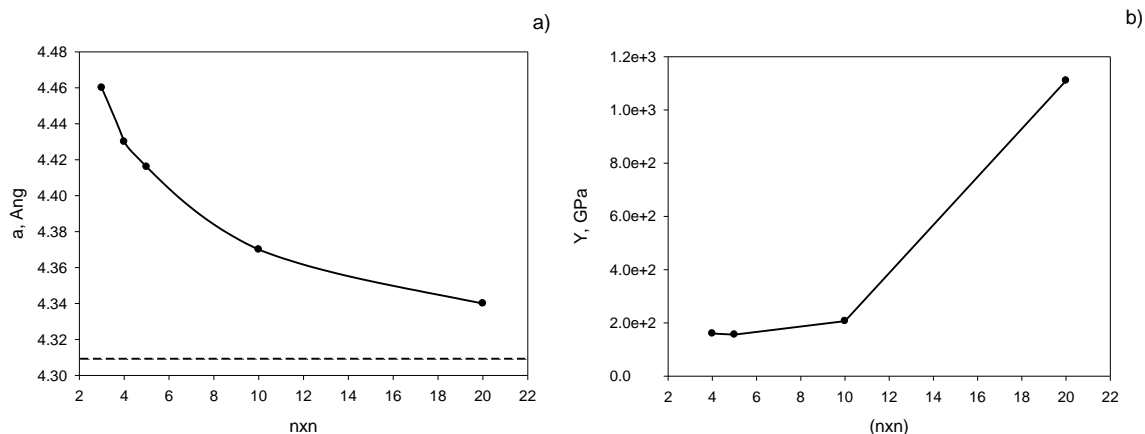


рис. 2 Зависимость а) параметра элементарной ячейки,  $a$ , (пунктирной линией обозначен параметр решетки кристалла SiC-3C) и б) модуля Юнга от индекса НВ,  $n$

Кроме того, важную роль в нанoeлектронике могут играть соединения SiC-НВ выращенных в различных направлениях, которые могут применяться в качестве переключателей. Материалы из рассмотренных SiC-НВ могут быть использованы в качестве пружин и механо-электрических элементов в микромашинах, строительных блоков для новых наноматериалов.

Были исследованы соединения SiC-НВ в различных кристаллографических направлениях  $\langle 110 \rangle$  и  $\langle 112 \rangle$  (рис. 3). Для исследования поведения такого соединения под давлением нами был использован «метод поверхности», суть которого состоит в том, что поверхность из неподвижных атомов (углерода) используется как пресс, для постепенного сдвигания структуры. Этот метод был применен в работе [3]. При применении давления к  $\langle 112 \rangle$  ветви, она, постепенно сгибаясь, деформировала основание (SiC-НВ  $\langle 110 \rangle$ ). Это связано с тем, что геометрическая ширина основания и ветви не равны между собой, таким образом, прочность на изгиб последней выше, чем у первой. Более подробно свойства данных соединений авторы предполагают рассмотреть позднее.

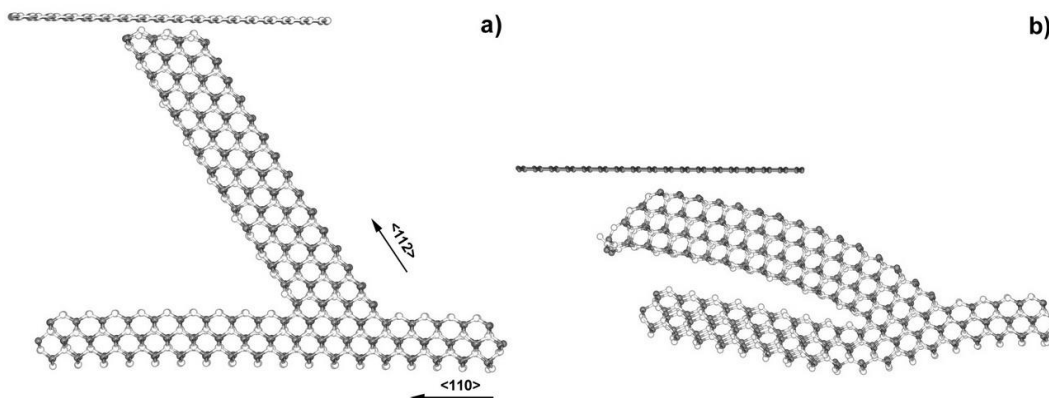


рис. 3. Соединение SiC-HB <110>-<112>: а) до и б) после приложения давления к ветви <112>

Список публикаций:

- [5] Maxim A. Makeev and Deepak Srivastava, Madhu Menon, Silicon carbide nanowires under external loads: An atomistic simulation study, *Phys.Rev. B* 74, 165303 (2006)  
 [6] J. Tersoff, Empirical Interatomic Potential for Carbon, with Applications to Amorphous Carbon, *Phys. Rev. Lett.*, 61, 2879 (1988); Empirical interatomic potential for silicon with improved elastic properties, *Phys. Rev. B*, 38, 9902 (1988)  
 [7] E. Belova, L.A. Chernozatonskii, Mechanical properties of carbon nanotube bough junctions: A theoretical study, *Phys. Rev. B* 75, 073412 (2007)

## Автоколебательное пластическое деформирование полимеров

**Ковальчук Екатерина Петровна**

Баженов Сергей Леонидович

Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН

Баженов Сергей Леонидович

[Kotja777@yandex.ru](mailto:Kotja777@yandex.ru)

При растяжении полимеров иногда наблюдается механизм неустойчивого пластического течения, состоящий в периодических ускорениях течения материала. В настоящей работе предложена система математических уравнений (1-3), качественно описывающая неустойчивое пластическое течение полимера. Скачкообразное изменение скорости пластического течения в ПЭТФ обусловлено периодическим разогревом узкой фронтальной зоны перехода неориентированного полимера в ориентированное состояние, где локализовано пластическое деформирование. Увеличение температуры экспоненциально ускоряет пластическое течение полимера во фронте перехода.

Разогрев переходной зоны обусловлен переходом в тепло механической работы, совершаемой при удлинении полимера. Особенностью неустойчивого пластического течения полимеров является наличие критической длины образца, ниже которой (в относительно коротких образцах) пластическое течение сначала является устойчивым. Это объясняется тем, что для возникновения автоколебаний образец должен запасти достаточное количество упругой энергии, которой должно хватить для разогрева некоторой области перед фронтом ориентированного полимера.

1. Уравнение изменения напряжения

$$\frac{d\sigma}{dt} = \frac{v - (\lambda - 1)u}{D}, \quad (1)$$

где  $D=L/E$  - податливость,  $E$  - модуль упругости.

2. Уравнение теплопроводности в набегающем потоке

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + u \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{2\beta(T - T_0)}{\rho Ch} + \delta(0) \frac{\sigma u (\lambda - 1)}{k}, \quad (2)$$

Граничные условия:

$$T|_{x \rightarrow +\infty} = T_0, \quad T|_{x \rightarrow -\infty} = T_0, \quad T|_{x \rightarrow 0} = T|_{x \rightarrow +0}$$

Здесь  $T$  и  $T_0$  – температура полимера и окружающей среды соответственно,  $k$  – коэффициент теплопроводности,  $\lambda$  – степень ориентационной вытяжки,  $\rho$  – плотность,  $C$  – теплоемкость полимера,  $x$  – направление движения фронта ориентации,  $\beta$  – коэффициент теплообмена с внешней средой,  $h$  – толщина образца,  $\delta(0)$  – дельта-функция Дирака.

### 3. Скорость пластической деформации

$$u(t) = \varepsilon_0 d \exp\left(\frac{\alpha \sigma - U}{RT}\right). \quad (3)$$

где  $\varepsilon_0$  – частота атомных колебаний,  $\alpha$  – свободный объем,  $U$  – энергия активации,  $R$  – универсальная постоянная,  $d$  – длина переходной зоны (полагали  $d=h$ ,  $h$  – толщина пленки).

Таким образом, построена основа теории автоколебательного пластического деформирования полимеров, сравнительно адекватно описывающая экспериментальные данные. В работе получен весьма неожиданный результат. Он заключается в том, что система уравнений (1-3) предсказывает существование колебаний на растущей ветви скоростной зависимости нижнего предела текучести (при высоких скоростях растяжения). Это означает, что неустойчивость, описываемая уравнением теплопроводности, представляет собой новый тип колебаний, качественно отличающийся от релаксационной неустойчивости типа периодического проскальзывания груза по столу.

Второй вывод состоит в том, что предложенная в работе система уравнений позволила устранить все имевшиеся принципиальные расхождения теории и эксперимента. Жесткий характер возбуждения колебаний объясняется переходом полимера в высокоэластическое состояние при температуре стеклования. Имеется три интервала скоростей растяжения. При низких скоростях растяжения, когда не выполняется критерий Давиденкова, распространение шейки является абсолютно устойчивым и колебания не возбуждаются. При высоких скоростях растяжения, когда в условиях стационарного растяжения достигается температура стеклования полимера, возбуждение колебаний носит мягкий характер и существует критическая длина образцов, ниже которой колебания не возбуждаются. В промежуточном скоростном интервале возбуждение носит жесткий характер. В этом интервале скоростей колебания возбуждаются, если амплитуда «толчка» оказывается значительной и в переходной области достигается температура стеклования полимера. В координатах скорость растяжения – длина образцов построена диаграмма, описывающая области колебательного поведения образцов.

Список публикаций:

[1] Баженов С. Л., Ковальчук Е. П. // ДАН. 2007. Т. 417. № 3). С. 353.

## Исследование дефектной структуры в Cu и Ni после интенсивной пластической деформации

*Корзникова Елена Александровна*

*Институт проблем сверхпластичности металлов РАН*

*Мулюков Харис Якупович*

*[helenne@yandex.ru](mailto:helenne@yandex.ru)*

Одним из наиболее распространенных способов получения массивных металлических образцов с субмикроструктурной и нанокристаллической структурой является интенсивная пластическая деформация (ИПД). Этот способ позволяет достигать очень больших степеней деформации даже для хрупких материалов благодаря наличию во всех схемах ИПД компоненты квазигидростатического давления, которая влияет на процессы образования и взаимодействия дефектов решетки. Проведенные в последнее время экспериментальные исследования и результаты моделирования [1-2] показали, что помимо высоких плотностей дислокаций, в материалах после ИПД имеют место высокие концентрации дефектов точечного типа. Возможно, это объясняется наличием компоненты гидростатического давления в процессе деформации, так как исследования, проведенные на аналогичных материалах после обычной деформации, таких высоких концентраций точечных дефектов не выявили [3].

Целью настоящей работы было исследование зависимости концентрации точечных дефектов и плотности дислокаций в металлах после ИПД от величины приложенного давления и степени деформации методами дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) и рентгеноструктурного анализа (РСА).

Образцы Cu чистотой 99.99% и Ni 99,998% деформировались кручением на наковальне Бриджмена под давлением 2,4 и 8 ГПа до степеней деформации  $\gamma_T = 1 - 134$ ,

$$\gamma_T = \frac{r \times \varphi}{d}, \quad (1)$$

где  $r$  - радиус образца,  $d$  - его толщина и  $\varphi$  - угол поворота наковальни в радианах.

В процессе нагрева в калориметре отжиг дефектов деформационного происхождения вызывает появление экзотермических пиков на кривой нагрева. Площадь пика при этом соответствует общей энергии отоженных дефектов, из которой можно получить данные о плотностях дислокаций и концентрациях вакансий.

Были проведены также рентгеноструктурные исследования на высокоразрешающем рентгеновском дифрактометре с использованием  $\text{Cu K}\alpha_1$  излучения и последующий анализ уширения пиков из которых определяли плотность дислокаций.

На графике (рис. 1-а) показаны плотности дислокаций, рассчитанные методами ДСК и РСА. Как уже было показано в [3], плотности дислокаций определенные методом РСА значительно ниже величин, получаемых из кривых ДСК при одинаковых приложенных давлениях и деформациях.

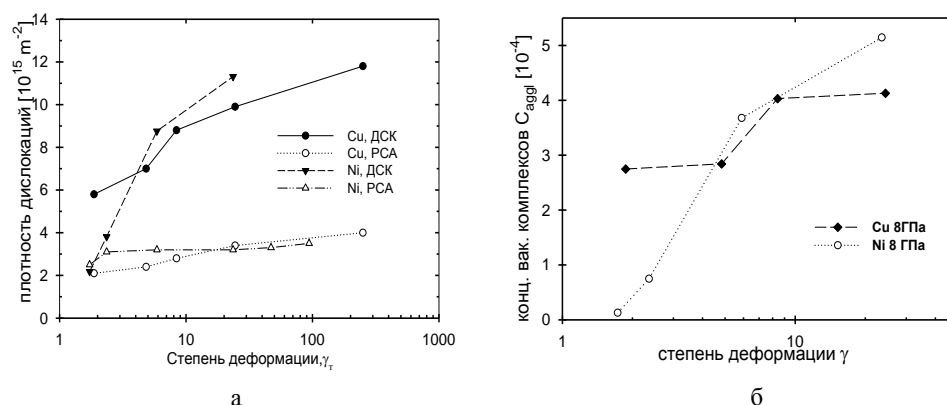


рис.1. Плотности дислокаций(а) и вакансионных комплексов (б) рассчитанные из результатов РСА и ДСК исследований в Cu 99,99% и Ni 99,998% после ИПД кручением

Несоответствие значений плотностей дислокаций, рассчитанных двумя разными методами, было объяснено наличием в структуре комплексов точечных дефектов [3].

Из результатов расчетов для Ni и Cu (рис 1-б), видно, что скорость накопления дефектов с ростом степени деформации различна для двух металлов. В случае меди насыщение происходит при меньших деформациях и меньших значениях концентрации, чем в случае никеля. Различная кинетика накопления дефектов обусловлена разницей в энергиях дефекта упаковки и, как отмечалось выше, разной гомологической температурой деформации.

Полученные значения концентраций вакансионных комплексов близки по порядку величины к концентрациям точечных дефектов при предплавленной температуре и могут играть большую роль в формировании структуры и свойств наноматериалов, полученных ИПД.

Конечные плотности всех типов дефектов, их количественные соотношения, а также кинетика их накопления в процессе деформации зависят от энергии дефекта упаковки материала и гомологической температуры деформации.

Список публикаций:

- [1] Zehetbauer M., Zeipper L. E., Schafner E., Proc. 2006 TMS Annual Meeting, San Antonio, 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Ultrafine Grained Materials, ed. Y.T. Zhu et al., TMS pub., Warrendale, , 217-226 (2006)
- [2] Кесарев В., Кондратьев В.В., Гапонцев В.Л., ФММ, т.98, №6, 18-24 (2004).
- [3] E. Korznikova, E. Schafner, G. Steiner, M. Zehetbauer, Proc. 4th Int. Symp. on ultrafine grained materials, ed. Y.T. Zhu et al., TMS pub., Warrendale, 97-102 (2006)

## Угар и ликвация свинца при выплавке свинцовистых бронз

*Мартюшев Никита Владимирович*  
*Томский политехнический университет*  
*Егоров Юрий Петрович, к.т.н.*  
*[nikitoid@mail.ru](mailto:nikitoid@mail.ru)*

Двухфазные свинцовистые бронзы используются в машиностроении для изготовления изделий с высокими антифрикционными и противозадирными свойствами, например, подшипников скольжения. Однако такие бронзы обладают низкими механическими характеристиками из-за большого количества свинца. Свинец практически не растворяется в меди и образует включения, значительно снижающие прочностные характеристики бронзы. Количество свинца введенного в расплав, а так же потерянного при ведении плавки и в процессе затвердевания будет оказывать значительное влияние на механические и триботехнические свойства отливок.

На кафедре материаловедения и технологии металлов МСФ ТПУ уже несколько лет ведутся работ по изучению свинцовистых, свинцово-оловянистых и многокомпонентных бронз. Основываясь на данных исследователей и собственных исследовательских работах, было выполнено достаточно много исследований по этой теме. В работах использовались новые методы изучения гетерофазного строения, опубликованные в работах [1,2] с помощью разработанной на кафедре компьютерной программы “Система КОИ”. Целью настоящей работы является оценка угара и ликвации свинца при выплавке свинцовистых бронз.

Необходимость проведения настоящих исследований вызвана несколькими причинами. Во-первых, несмотря на простой химический состав бинарных свинцовистых бронз в литературе присутствуют разногласия по поводу возможности растворения свинца в меди и меди в свинце. Так большинство авторов придерживается мнения, что небольшой процент свинца теряемого при плавке бронз уходит в угар, однако другими авторами утверждается, что небольшой процент свинца в определенных случаях может быть растворен в меди. Во-вторых, в литературе присутствуют некоторые разногласия по вопросу прямой и обратной ликвации в свинцовистых бронзах, недостаточно данных о количественных характеристиках процесса и о конкретных скоростях охлаждения.

В ходе экспериментов были получены образцы из бронзы марки БрС10. Плавка велась в высокочастотной индукционной тигельной печи ВЧГ2-100/0,066 из технически чистых компонентов в тигле из силицированного графита. Раскисление проводилось фосфористой медью перед закладкой свинца в расплав. Температура заливки составляла 1150°C и контролировалась быстродействующим оптическим пирометром ТПТ-90 с лазерным наведением. Скорости охлаждения измерялись с помощью разработанного на кафедре МТМ ТПУ прибора “Термограф” по методике описанной в [3]. Для полученных образцов были проведены рентгено-флуоресцентный (РФА) и металлографический анализы. Следует заметить, что влияние наследственности шихтовых материалов не учитывалось в настоящих исследованиях.

Результаты проведенного рентгено-флуоресцентного анализа (РФА) свидетельствуют о малом угаре свинца, не более 0,5%. Для образцов заливаемых в холодную форму имеет место явление обратной ликвации, когда значительное количество легкоплавкой фазы выделяется на поверхности отливки в виде тонкого поверхностного слоя. Измерение скорости охлаждения показало, что это происходит при скоростях охлаждения ~90-100°/с (в интервале от температуры заливки до 800°C). На поверхности выделяется по данным РФА около 15% свинца (от всей его массы), что согласуется с его расчетной массой выделившегося на поверхности. На фотографиях микроструктуры толщина поверхностного слоя выделившегося свинца составляет около 0,27мм (среднее значение по результатам более чем 10 измерений). Таким образом, расчетное количество свинца выделившегося на поверхности по расчетам ~19,7% (от его общего количества по массе) несколько превышает данные РФА анализа ~15%. Расхождение объясняется неравномерностью распределения свинца по сечению отливки. Диаметр рентгеновского пучка, излучаемого родиевой трубкой, составляет 34 мм и захватывает только центральные части отливки. Проведенный анализ распределения свинца по сечению отливки с помощью программы “Система КОИ” показывает, что наибольшее количество свинца располагается в центральной части отливки (8,8-8,9% по массе) и в небольшом поверхностном слое (до 10% по массе). Срединный слой получается обедненным по свинцу (7-8% по массе). Таким образом, промежуточный слой отливки, обедненный легкоплавкой составляющей, оказывается частично исключенным из расчета, чем и объясняются меньшие потери, показанные РФА анализом. Расчет, произведенный с помощью программы “Система КОИ” совпал с данными расчетов с точностью 3%.

Такое распределение легкоплавкой фазы объясняется следующим: создаваемая усадкой внешних слоев давлением свинцовая фаза, находящаяся в жидком состоянии, просачивается по межзерненным промежуткам (как показали проведенные металлографические исследования) и, выходя наружу, упирается в литейную форму и растекается ровным слоем по поверхности отливки. В момент окончательной кристаллизации поверхностного



слоя не успевшие выделиться на поверхность скопления свинца оказываются зажаты между кристаллами меди. С удалением от края скорость охлаждения снижается, в результате снижается разность усадки слоев бронзы и сила выталкивающая свинец на периферию. Получается, что из промежуточного слоя часть свинца выделилась в поверхностные слои и на поверхность, а из центральной зоны в промежуточную ликвация шла более медленными темпами. В результате этого промежуточный слой получился обедненным легкоплавкой фазой, а в центральной зоне её содержание осталось на одном уровне и более равномерно распределено.

Таким образом, полученные данные соответствуют положениям, опубликованным в работе [4] по механизму обратной ликвации. Близость результатов полученных тремя различными методами РФА, компьютерным анализом и математическим расчетом говорит о достоверности полученных результатов. Полученные данные говорят о ликвации легкоплавкой фазы в случаях быстрого охлаждения, в будущем планируется изучить её распределение в условиях медленного охлаждения.

Список публикаций:

- [1] Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ № 2004610217. Система компьютерной обработки изображений (Система КОИ). / Ю.П. Егоров, Н.В. Мартюшев. Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 19.01.2004.
- [2] Martyushev N.V., Egorov Yu.P. DETERMINATION OF THE SIGNAL STRENGTH WITH THE COMPUTER ANALYSIS OF THE MATERIAL STRUCTURE // 9 Anniversary International scientific - practical conference «Modern technique and technologies». – Tomsk: TPU, 2003. – V.1. – P.192–194.
- [3] Корчмит А. В., Егоров Ю.П. Методика определения скорости охлаждения бронзы Бр. ОСЦН 10-13-2-2 в формах с разной теплопроводностью // Обработка металлов. – 2005. – № 1. – С.23–25.
- [4] Горшков, И. Е. Литье слитков цветных металлов и сплавов : учебное пособие. — М. : Металлургиздат, 1952. — 416 с.

## **Экспериментальное и теоретическое исследование термической стабильности микроструктуры и свойств микрокристаллической хромовой бронзы**

**Мелёхин Николай Владимирович**

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского*

*Чувильдеев В.Н.*

*[melehin@nifti.unn.ru](mailto:melehin@nifti.unn.ru)*

В данной работе проведены исследования микрокристаллической хромовой бронзы Cu-0.6%Cr-0.1%Zr. Субмикронный размер зерна в исследуемом сплаве был получен по технологии равноканального углового прессования (РКУП). После 4-12 циклов РКУП размер зерна в материале составлял 300-100 нм.

Были проведены исследования процесса стабилизации субмелкозернистой структуры меди дисперсными частицами хрома в условиях повышенных температур (до  $0,5 T_m$ ). Параллельно изучалось влияние дисперсных частиц хрома на прочностные характеристики материала.

Для изучения процесса выделения частиц использовался метод измерения удельного электросопротивления (УЭС). Согласно правилу Маттисена – Флеминга, повышение УЭС материала прямо пропорционально повышению концентрации легирующего элемента в твердом растворе. Выделение частиц второй фазы приводит к изменению концентрации легирующего элемента в твердом растворе и, соответственно, к изменению УЭС.

Для исследования температурно-временных зависимостей прочностных свойств материала в работе применялся метод измерения микротвердости. Микротвердость является структурно-чувствительной характеристикой, зависящей от размера зерна, объемной доли и размеров дисперсных частиц в материале. Измерения микротвердости проводились параллельно с измерением УЭС как на МК, так и на литом (крупнокристаллическом) материале.

Для исследования зеренной структуры сплава применялись оптическая металлография и атомно-силовая микроскопия (АСМ).

Анализ всего комплекса полученных в работе экспериментальных данных (УЭС – для изучения распада твердого раствора, АСМ – для изучения эволюции зеренной структуры и микротвердости – для изучения эволюции прочностных свойств материала), позволил построить модель эволюции структуры и свойств, а также модель распада пересыщенного твердого раствора и выделения дисперсных частиц в материале.

В результате анализа процесса выделения частиц хрома из пересыщенного твердого раствора, показано, что кинетика выделения дисперсных частиц хрома в меди носит многостадийный характер. Стадийность наблюдается как в литом, так и в МК материале. Смена стадий распада пересыщенного твердого раствора в материале обусловлена сменой доминирующих механизмов диффузии.

Косвенным путем были определены размеры частиц, выделяющихся в материале в процессе термообработок. На основе анализа кинетики выделения частиц и изменения их размеров определены интервалы температурной стабильности зеренной структуры в МК материале.

На основе построенной модели эволюции механических свойств исследуемого сплава объяснена температурная зависимость микротвердости материала. Экспериментально обнаруженный эффект «наибольшего упрочнения» в МК материале после получасового отжига при 450 °С хорошо согласуется с теоретическими оценками, полученными в рамках построенной модели.

## **Перспектива производства деталей типа «вал» методом равноканального углового прессования**

*Мордовской Петр Григорьевич*

*Борисова Мария Захаровна*

*Институт физико-технических проблем Севера СО РАН*

*[mordov@yandex.ru](mailto:mordov@yandex.ru)*

Современное машиностроение развивается в направлении увеличения производства более точных прецизионных деталей, поэтому перед учеными ставится задача поиска новых методов достижения заданной высокой точности. Обычно для достижения высокой точности деталей требуется выполнение большого количества технологических операций обработки поверхностей, что может негативно отразиться на физико-механических параметрах и структуре материала. Альтернативным методом достижения этой высокой точности и сохранения заданных характеристик материала при некотором сокращении числа операций может стать технологический процесс получения наноструктурных материалов.

Наноструктурное состояние для заготовок типа «вал» с поперечным сечением до 50 мм и с неограниченной длиной может быть получено методом равноканального углового (РКУ) прессования, которое позволяет достичь очень больших деформаций при относительно низких температурах в условиях высоких приложенных давлений в течении короткого промежутка времени.

При реализации РКУ прессования заготовка неоднократно продавливается в специальной оснастке-матрице через два канала с одинаковыми поперечными сечениями, пересекающимися обычно под углом от 90 до 120°. При необходимости в случае труднодеформируемых материалов деформация осуществляется при повышенных температурах. Существует несколько технологических маршрутов обработки заготовки в зависимости от геометрии каналов, температурного режима, скорости прессования, количества проходов, угла и направления прессования.

Исследования структуры конструкционных сталей показали, что РКУ прессованием можно достичь измельчения зерна до субмикронного и нанометрового диапазона - зерна становятся равноосными с большеугловыми границами, при этом структура стали гомогенизируется. Эксперименты, проведенные на сталях после РКУ прессования, показали, что происходит улучшение механических свойств таких как твердость, пределы прочности и текучести. Предварительные исследования изменения шероховатости поверхностей наноструктурированных сталей при воздействии контактных нагрузок выявили их быстрое сглаживание. Уменьшение шероховатости и улучшение механических свойств заготовки, вероятно, сократят количество технологических операций.

Однако, требуется дальнейшее экспериментальное подтверждение сокращения термо-механических операций у стали, обработанной на заготовительной стадии РКУ прессованием, по сравнению с обычной крупнозернистой конструкционной сталью при условии достижения одинаковой точности. Также необходимо определить наиболее оптимальные режимы РКУ-прессования для решения поставленной задачи.

Список публикаций:

[1] Яковлева С.П., Махарова С.Н., Борисова М.З. Структура, свойства и особенности разрушения низколегированной стали в субмикрокристаллическом состоянии // *Металлы*.-2006.-№4.-С.71-78.

[2] Яковлева С.П., Махарова С.Н., Борисова М.З. Особенности строения, механические свойства и износостойкость материалов с субмикрокристаллической структурой на примере стали 09Г2С / Тез. докл. II Всеросс. конф. по наноматериалам «Нано 2007» и IV Российско-Белорусского междунар. семинара «Наноструктурные материалы-2007», посвященных 50-летию СО РАН (Новосибирск, 13-16 марта 2007г.).-Новосибирск, 2007.-С.412.

## Предварительные данные исследований технологии Light Scribe

*Перевалов Андрей Павлович*

*Иркутский государственный университет*

*Мартынович Евгений Федорович, д.ф.-м.н.*

*[velkormchy@rambler.ru](mailto:velkormchy@rambler.ru)*

Все чаще и чаще на компьютерах и приводах DVD можно увидеть знак Light Scribe. Что же это такое? Если перевести выражение Light Scribe на русский язык буквальным образом то, получим «светопись». Здесь буквальный перевод является правильным, так как сущность этой технологии – нанесение визуальной информации, как текстовой, так и графической, на поверхность диска, покрытую специальным светочувствительным составом, при помощи луча того же лазера, что и используется для записи данных на диск. Данная технология сравнительно нова, и требует более подробных исследований, в первую очередь – в отношении светочувствительного вещества. Аппаратной основой светописи является лазер, работающий на красном излучении. Заявленная производителем (Hewlett-Packard) длина волны рабочего излучения – 780 нм, инфракрасная область. Разрешение получаемого изображения-300, 600 и 1200 точек на дюйм.

Для выполнения практических исследований образцы пластинок, на которые напыляется фотохром, были отделены от предназначенного для записи данных слоя диска. Первая часть практических исследований – изучение спектра поглощения. За измеряемую величину здесь была взята оптическая плотность. Основу экспериментальной схемы составлял спектрограф Ocean Optics QE65000, подключаемый к персональному компьютеру. Одним из результатов опыта было обнаружение локального максимума поглощения в области вокруг длины волны 780 нм. Была измерена высота локального пика оптической плотности, за вычетом оптической плотности на уровне линии, который имел бы место в случае отсутствия такого пика, для случаев проэкспонированного и непроэкспонированного фотохрома, результат составляет приблизительно 0,6 единиц оптической плотности для обоих вышеупомянутых случаев, с учетом погрешности измерения. Кривые спектра поглощения фотохрома были получены относительно спектра поглощения чистых образцов пластика, на который напыляется фотохром. Спектр поглощения чистого пластика лежит в области около 0,4-0,5 единиц оптической плотности. Логичным также является то, что кривая оптической плотности засвеченного образца фотохрома (более темный цвет) лежит несколько выше, чем аналогичная кривая для чистого образца, значение оптической плотности в пике для длины волны 780 нанометров в случае проэкспонированного образца примерно на 0,15 единиц оптической плотности выше, чем для незасвеченного образца (0,94 и 0,79 единиц соответственно).

Во второй части образцы были исследованы на предмет люминесценции. Вначале испытания носили качественный характер – на образцы было направлено поочередно излучение синего и зеленого светодиодов. Наблюдение происходило через оранжевый светофильтр. В результате через светофильтр было возможно наблюдать оранжевое излучение от испытуемых образцов, что устанавливает способность данной фотоувствительной среды люминесцировать. Образец пластика, на который напыляется фотохром, также был подвергнут испытанию на предмет люминесценции, но его вклад в люминесценцию незначителен. Затем люминесцентные свойства фотохрома были исследованы при помощи вышеупомянутого спектрографа. При воздействии зеленым лазером на фотохром имеет место люминесценция на длине волны в области около 660 нм для экспонированного и 650 нм для неэкспонированного образца, а в области около 600 нм проявляется комбинационное рассеяние. Для проэкспонированного образца область пика люминесценции также более растянута. Имеет значение и то, какой стороной по отношению к лазеру обращены фотохромные пластинки. В случае, если луч лазера падает на сторону, противоположную фотохрому, общая интенсивность излучения, попадающего в спектрограф, ниже, но отношение интенсивности люминесценции фотохрома к интенсивности комбинационного рассеяния пластинки будет выше единицы, и наоборот, при падении луча лазера на сторону с фотохромом общая интенсивность излучения выше, но наблюдается отношение интенсивности люминесценции к интенсивности комбинационного рассеяния, меньшее единицы. Возможное разумное объяснение последнего состоит в том, что люминесцентное излучение фотохрома несет меньшие относительные потери по сравнению с рассеянным излучением в первом случае, но при этом фотохром пропускает получаемое люминесцентное и рассеянное излучение хуже, чем пластмасса.

Представляет также отдельный интерес то, какую нагрузку испытывает электронно-вычислительная система при выжиге изображения на поверхности диска. Использовалась система с двухядерным процессором AMD Turion 64 x2 TL-64 (тактовая частота -2,2 ГГц), загрузка процессора – от 1 до 7%, 2 ГБ оперативной памяти, ее использование – 1080 МБ, и операционной системой Windows Vista, для выполнения выжиг применялось ПО Nero Burning ROM 7.8.5.0. При разрешении 1200 точек на дюйм и наивысшем качестве изображения прожиг всей поверхности диска занимает 25-30 минут для вышеописанной системы.

Используя полученные данные, возможно сделать анализ и вывод относительно возможности улучшений в данной технологии светописи. Одной из возможностей применения Light Scribe можно назвать использование

такой светописи при нанесении меток (кодов, номеров) на диски там, где они хранятся в больших количествах – библиотеки, архивы и т.д. Преимущество такой маркировки по сравнению с использованием любых фломастеров и принтеров – то, что нанесение чернил на диск отрицательно влияет на сохранность данных на дисках, в первую очередь – из-за нарушения защитного слоя. При светописи используются примерно те же механизмы, что и при записи и чтении, а именно воздействие лазерного луча, не повреждающее защитный слой так сильно, как внедрение чужеродного вещества.

## **Нанотехнологии в телекоммуникациях**

*Перевалов Андрей Павлович*

*Иркутский государственный университет*

*Гаврилюк Алексей Александрович, к.ф.-м.н.*

*[velkormchy@rambler.ru](mailto:velkormchy@rambler.ru)*

Нанотехнологии – технологии объектов, геометрические размеры которых составляют порядка  $10^{-9}$  м. Одним из основных свойств нанотехнологий является подчинённость их процессов законам квантовой механики.

Синтез и особенности свойств наноструктурированных материалов создают основу для разработки устройств микроэлектроники, а значит и вычислительной техники нового поколения. В этой области наметился устойчивый переход от микронного масштаба к нанометровому.

Основные области применения нанотехнологий: магнитные и магнитооптические носители информации, передача информации в волоконно-оптических линиях связи, повышение степени интеграции электронно-вычислительных схем.

Углеродные нанотрубки представляют собой крошечные цилиндры или цилиндрические образования с диаметром от 0,5 до 10 нм и длиной примерно в 1 мкм. Они похожи на свёрнутые в рулоны «листы», образованные из шестигранных структур и колец из атомов углерода.

Ранее считалось, что углерод имеет лишь 2 кристаллические формы (алмаз и графит), однако в 1985 году была обнаружена и третья аллотропная форма углерода, т. н. фуллерены, представляющие собой огромные молекулы углерода в виде замкнутых структур, по форме близких к шарообразной.

Углеродные нанотрубки образованы из таких же кристаллических структур, но собранных в другую форму. Из областей технического применения этих материалов следует особо отметить полупроводниковую технику и аккумуляцию (поглощение и хранение водорода). Возможность введения в углеродные нанотрубки различных веществ позволяет говорить об их возможном использовании в электронной технике, за счёт преобразования и модификации наноструктур в нанометровом масштабе, т. е. повышения степени интеграции.

Уже реализован такой тип полупроводниковых устройств, как одноэлектронные транзисторы и запоминающие устройства, основанные на управлении движением отдельных электронов. Принцип работы таких устройств составляет явление квантовой точки. Образуются квантовые точки в процессе самосборки: если на кристаллическую поверхность кремния или арсенида галлия нанести небольшое число атомов другого вещества (например, атомов Ge), то через некоторое время можно наблюдать, как эти «чужеродные» атомы сами собираются в некоторые структуры (так называемые «островки», островные кристаллические структуры) размером в несколько десятков нм. Структуры такого типа и являются квантовыми точками, т. е. локальными образованиями, представляющими собой трёхмерные «ловушки» для электронов. Одноэлектронные устройства характеризуются значительно меньшим энергопотреблением, а в перспективе – и отсутствием конденсаторов. Это ещё один путь повышения степени интеграции электронных схем.

Принципиально новым материалом для создания запоминающих и сетевых устройств являются наностёкла, основанные на создании на поверхности стёкол структур в виде сот, заполняемых «столбиками» из различных наноматериалов. Такие стёкла представляют собой сочетание нанокристаллитов и аморфных зерен, заполняющих упорядоченную структуру. Коэффициент преломления таких стёкол может изменяться в очень широких пределах. Механизм этого эффекта обусловлен особенностями поведения электромагнитных полей в чередующихся слоях наноразмерных кристаллических и аморфных областей. Такие материалы будут всё шире применяться для создания новых высокоэффективных устройств хранения и передачи информации.

Теперь рассмотрим технологии непосредственно для передачи данных. Как известно, для передачи по оптоволоконным линиям между крупными узлами данные преобразовываются из оптических импульсов в электронные и обратно, что существенно снижает общую пропускную способность. Решением данной проблемы является переход от сетевых маршрутизаторов, в которых присутствуют электронные и оптические

компоненты на полностью оптические, основанные на сочетании полимерных цепей и сферических наночастиц. Важные шаги в этом направлении проделали недавно специалисты американской Национальной лаборатории в Беркли, университета Калифорнии и компании Superconnect. Нанопровода и наноленты – это цельные кристаллы, которые достигают миллиметра в длину, но только несколько десятков или сотен нанометров в толщину. Эти ленты и волокна могут служить оптическими волноводами для того, чтобы направлять фотоны через сложные схемы, в том числе – за счёт переизлучения (фотолюминесценции). Пока фотонная логическая система на одном чипе размером с обычные электронные микросхемы не создана, но американские исследователи приближаются к этому рубежу. И, возможно, самым существенным результатом данной работы можно назвать создание и апробацию оптических нановолноводов, которые могут управлять светом в зависимости от его взаимодействия с жидкостью. Точнее, свойства самой жидкости могут менять параметры сигнала на выходе такого волновода. Это открывает возможность построения оптических чипов, анализирующих химический или биологический состав капель, помещённых на их поверхность. По оценкам специалистов, скорость передачи в полностью фотонных сетях может составлять 160 Гбит/сек.

Принципиально новым материалом для создания запоминающих и сетевых устройств являются наностёкла, основанные на создании на поверхности стёкол структур в виде сот, заполняемых «столбиками» из различных наноматериалов. Такие стёкла представляют собой сочетание нанокристаллитов и аморфных зерен, заполняющих упорядоченную структуру. Коэффициент преломления таких стёкол может изменяться в очень широких пределах. Механизм этого эффекта обусловлен особенностями поведения электромагнитных полей в чередующихся слоях наноразмерных кристаллических и аморфных областей. Такие материалы будут всё шире применяться для создания новых высокоэффективных устройств хранения и передачи информации.

Особого внимания заслуживают наноантенны для видимого света на основе нанотрубок. Ян Ван из колледжа Бостона и его коллеги получили первый прототип антенны для волн видимого света. На подложке они разместили множество углеродных нанотрубок, установленных вертикально. При этом трубки были соединены между собой случайным образом. Выяснилось, что вся система реагирует на свет примерно так же, как радиоантенны реагируют на радиоволны. В трубках и их соединениях свет возбуждал слабые электрические токи. Наведение электрического тока в матрице из наноантенн оказалось возможным, так как размеры углеродных трубок были сопоставимы с длиной волны. Как сообщает сайт компании Fujitsu, корпорация планирует создание и внедрение в массовое производство передающих оптических устройств, основанных на лазерах с квантовыми точками. Наиболее существенными преимуществами таких систем по сравнению с полупроводниковыми являются минимальная зависимость от температуры, низкий уровень энергопотребления, более высокие показатели как по скорости, так и по расстоянию передачи информации.

Научными работниками Университета Торонто производятся похожие разработки, которые конкретно касаются передачи данных между микросхемами и базируются на инфракрасном лазере, работающем по принципу коллоидных квантовых точек, и распределённом по всей микросхеме.

К числу наиболее успешных изысканий в области радиопередачи сигналов и данных принадлежат исследования двух групп американских учёных, одна – из Национального Института Стандартов и Технологий, другая – из компании Freescale Semiconductor. Основная идея – передача радиосигнала посредством осцилляции поля наномангнитов, возникающей под действием электрического тока. Цель исследований – синхронизация излучения передатчиков, а значит, синфазность колебаний магнитов. В таком случае источники когерентны, следовательно, их общая интенсивность (мощность), по экспериментальным данным, в два раза больше, чем у некогерентных источников.

## **Моделирование и расчет физико-химических параметров процесса диффузии атомарного водорода на поверхности нанотруб различного размера и хиральности**

***Попов Максим Николаевич<sup>1</sup>***

*Кузубов Александр Александрович<sup>1,2,3</sup>, Раимова Мария Алиджановна<sup>2</sup>, Аврамов Роман Павлович<sup>1</sup>, Милютин Юлиа Михайловна<sup>2</sup>, Кожевникова Татьяна Александровна<sup>2</sup>, Артюшенко Полина Владимировна<sup>2</sup>*

*<sup>1</sup>Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, <sup>2</sup>Институт естественных и гуманитарных наук Сибирский федеральный университет, <sup>3</sup>Сибирский государственный технологический университет*

*Овчинников Сергей Геннадьевич, д.ф.-м.н.*

*[Max.N.Popov@gmail.com](mailto:Max.N.Popov@gmail.com)*

Углеродные нанотрубки (УНТ) считаются перспективными сорбентами водорода. Нанометровый масштаб и периодичность в одном измерении, присущая УНТ, обеспечили открытие в них интересных

механических, химических и электрических свойств. Удельная площадь поверхности УНТ, достигающая  $\sim 1000 \text{ м}^2/\text{г}$ , теоретически обеспечивает возможность удерживания в них больших количеств водорода, впрочем, как и инертных газов, металлов, воды и т.д.

Целью данной работы являлось исследование одного из аспектов проблемы применения металлов в качестве катализаторов диссоциации молекул водорода с последующим их «переливанием» на поверхность УНТ. Термин «переливание» (spillover) был введен более полувека назад. Суть этого эффекта состоит в том, что если молекулы адсорбируются на поверхность с низкой вероятностью (например, из-за малой вероятности их диссоциации или большой величины потенциального барьера), то для облегчения этого процесса в качестве промежуточной среды может быть использована адсорбция на поверхности другого материала. Например, в случае молекулярного водорода, он вначале может быть диссоциирован на атомарный водород на поверхности металла-катализатора, а затем атомы водорода уже могут переходить на другую адсорбирующую поверхность. Для эффективного протекания эффекта «переливания» необходимо изучить возможность протекания диффузии атомарного водорода на поверхности УНТ. Таким образом, в данной работе было проведено исследование процесса диффузии адсорбированного водорода на УНТ.

В работе была исследована диффузия на трубке с хиральностью (8,8), (5,5), (8,0). Все расчеты проводились в рамках формализма функционала плотности (DFT) с использованием пакета VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package). Для эффективного уменьшения количества базисных функций и увеличения скорости расчетов в программе для всех атомов использовались псевдопотенциалы Вандербиля (Vanderbilt). Для нахождения переходного состояния и потенциальных барьеров при перескоке атома водорода по поверхности УНТ был применен метод упругой ленты (nudged elastic band). Константы скорости перескоков атомов водорода по поверхности рассчитывались с помощью теории переходного состояния с учетом энергии нулевых колебаний атомов.

С топологической точки зрения, в каждой из труб можно выделить две неэквивалентно расположенные связи С–С. Структура (8,0) является представителем семейства труб (n,0) – зигзаг, в которой одна из связей направлена вдоль оси трубы, т.е. аксиальная – (ax), а вторая под углом  $60^\circ$  к оси, т.е. неаксиальная (nax). Подобным образом в трубах семейства (n,n) можно выделить связи перпендикулярные аксиальному направлению (pax) и связи перпендикулярная аксиальному направлению (npax).

В результате расчетов получены энергетические барьеры и константы скоростей и равновесия для процесса диффузии атома водорода по поверхности УНТ (таблица).

Рассчитанные константы скорости показывают, что процесс диффузии при стандартной температуре с внешней стороны трубы протекает с малой скоростью ( $k_{\text{макс}} < 10^{-4}$ ), в тоже время, с внутренней стороны данный процесс осуществляется гораздо быстрее ( $k_{\text{макс}} \sim 10^5$ ). Однако при повышении температуры скорость миграции водорода по углеродной поверхности значительно возрастает. Для труб с одинаковой хиральностью и различным диаметром ((5,5) и (8,8)) с увеличением диаметра трубы происходит увеличение константы скорости диффузии по внешней поверхности. На внутренней поверхности УНТ наблюдается обратная ситуация: с увеличением диаметра трубы происходит уменьшение константы скорости. В трубах с одинаковым диаметром, но разной хиральностью ((5,5) и (8,0)) скорость диффузии различна (в случае трубы типа «зигзаг» (8,0) она выше). Если диаметр трубы мал, наблюдается различие констант скорости для различных типов связей в углеродной трубе, для УНТ типа «зигзаг» (8,0) она более существенна, чем в трубе (5,5). Для трубы с большим диаметром (8,8) различия в константах скорости для неэквивалентных связей не прослеживается.

Анализ констант равновесия процесса приближение-удаление атома водорода к узлу поверхности УНТ, занятым другим атомом водорода показывает, что независимо от диаметра трубы и ее хиральности атомам водорода более выгодно находиться на соседних узловых углеродах нанотруб. Однако с повышением температуры данный эффект начинает нивелироваться.

Таким образом, исходя из проведенной работы, можно сделать предварительное заключение о возможности применения углеродных нанотруб в качестве хранилища водорода. При этом водород должен находиться в химически связанном атомарном состоянии. Процесс насыщения УНТ водородом необходимо проводить при повышенной температуре и наличии катализатора, который будет переводить водород в атомарное состояние. Высокая температура способствует диффузии, что должно приводить к равномерному распределению водорода по углеродной поверхности. При стандартной температуре миграция атомов водорода существенно затруднена.

Для извлечения из системы водорода необходимо повысить температуру системы, что приведет к повышению скорости диффузии и, как следствие, увеличению вероятности процесса ассоциативной десорбции.

		(5,5)		(8,8)		(8,0)		
		рах	прах	рах	прах	ах	пах	
Перескок одного атома водорода снаружи трубы	Е акт	153.833	147.924	127.601	125.913	99.741	139.481	
	к	298	$7.1 \cdot 10^{-15}$	$7.8 \cdot 10^{-14}$	$2.8 \cdot 10^{-10}$	$5.4 \cdot 10^{-10}$	$2.1 \cdot 10^{-5}$	$2.4 \cdot 10^{-12}$
		600	$1.9 \cdot 10^4$	$4.2 \cdot 10^4$	$6.5 \cdot 10^5$	$8.3 \cdot 10^5$	$2.6 \cdot 10^7$	$1.5 \cdot 10^5$
Перескок одного атома водорода внутри трубы	Е акт	58.156	76.651	74.438	86.933	44.234	59.460	
	к	298	405.568	0.235	0.0335	$1.4 \cdot 10^{-4}$	$1.0 \cdot 10^5$	227.1
		600	$1.0 \cdot 10^8$	$2.5 \cdot 10^6$	$3.8 \cdot 10^6$	$3.3 \cdot 10^5$	$1.6 \cdot 10^9$	$7.4 \cdot 10^7$
Перескок атома водорода в присутствии другого, атомы приближаются	Е акт	111.651	98.969	98.867	105.567	58.054	129.507	
	к	298	$1.7 \cdot 10^{-7}$	$2.8 \cdot 10^{-5}$	$2.9 \cdot 10^{-5}$	$2.0 \cdot 10^{-6}$	366.0	$1.3 \cdot 10^{-10}$
		600	$2.2 \cdot 10^3$	$2.7 \cdot 10^4$	$2.7 \cdot 10^4$	$7.0 \cdot 10^3$	$8.0 \cdot 10^7$	62.0
Перескок атома водорода в присутствии другого, атомы удаляются	Е акт	185.951	185.951	163.910	133.740	114.606	221.601	
	к	298	$1.8 \cdot 10^{-20}$	$1.4 \cdot 10^{-17}$	$1.3 \cdot 10^{-16}$	$2.4 \cdot 10^{-11}$	$5.3 \cdot 10^{-8}$	$1.0 \cdot 10^{-26}$
		600	$8.5 \cdot 10^{-4}$	$2.2 \cdot 10^{-2}$	0.068	27.0	$1.2 \cdot 10^3$	$7.1 \cdot 10^{-7}$

## Наноразмерные порошки системы FeCo: фазовый анализ

*Попова Анна Николаевна*

*Кемеровский государственный университет*

*Захаров Ю.А., д.х.н.*

*[zaharov@kemsu.ru](mailto:zaharov@kemsu.ru)*

Одним из наиболее перспективных классов в настоящее время признаны наноструктурные (наноразмерные) материалы. Проявляющиеся в них зачастую принципиального характера размерные особенности структуры и свойств стимулируют нарастающий интерес к разработке способов получения наноматериалов, изучению их свойств (магнитных, электрических и пр.) и вариантов практического использования.

Изучение таких наноразмерных объектов выявило достаточно большое количество «белых пятен» в фундаментальных знаниях природы нанокристаллического состояния и его стабильности при различных условиях.

Цель работы: определение фазового состава взаимной системы металлов железо-кобальт.

Объектами исследования были выбраны порошки системы железо-кобальт нанометрового диапазона. Порошки получали методом совместного восстановления из раствора солей металлов. Состав образцов варьировался при синтезе (с шагом 1%) и задавался процентным отношением  $Fe_{100-x}Co_x$ , где  $x \leq 100\%$ .

В настоящей работе использовался метод порошка в рентгеноструктурном анализе для определения параметров кристаллической решётки и уточнения структуры.

Порошки с содержанием железа в пределах от 65 до 100% окислялись при синтезе, поэтому данная область в этой работе не рассматривается, что представляет автору последующее изучение способов стабилизации и свойств порошков данной системы заданного состава. Т.о. в работе рассматривались порошки состава  $Fe_{100-x}Co_x$  ( $40 \leq x \leq 100\%$ ).

Сопоставляя вычисленные межплоскостные расстояния с табличными и учитывая интенсивность, проводился качественный рентгенофазовый анализ, из результатов которого получены следующие характерные особенности.

1) Основной фазой для составов с содержанием железа от 25 до 60% является фаза с объёмноцентрированной кубической (ОЦК) решёткой (характерной для обычного железа), в состав которой входит кобальт (рис. 1).

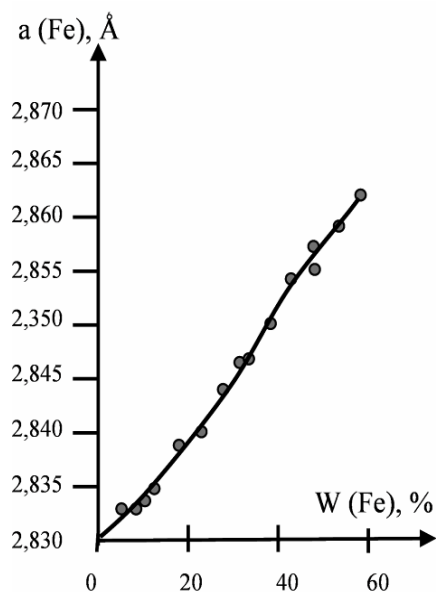


рис. 1. Параметр объёмноцентрированной кубической решетки "железной" фазы

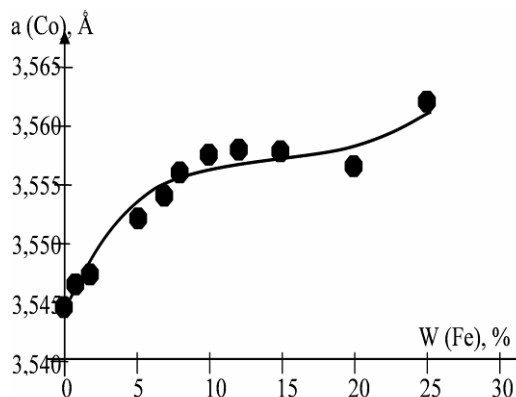


рис. 2. Параметр гранецентрированной кубической решетки «кобальтовой» фазы

2) Для составов с содержанием железа от 1 до 10% основной фазой становится метастабильная фаза с гранецентрированной кубической (ГЦК) решёткой, характерной для обычного кобальта (рис. 2).

3) Межплоскостные расстояния для обеих фаз равномерно увеличиваются по мере увеличения в образцах железа. Данный факт говорит о том, что возможно образование твёрдого раствора.

4) При содержании железа от 10 до 25% сосуществуют две фазы «железная» объёмноцентрированная и кубическая «кобальтовая».

5) Помимо металлических фаз встречаются фаза  $\text{Co}(\text{OH})_2$  (рис. 3) и фазы сложного состава типа  $(\text{Fe},\text{Co})\text{OOH}$ .

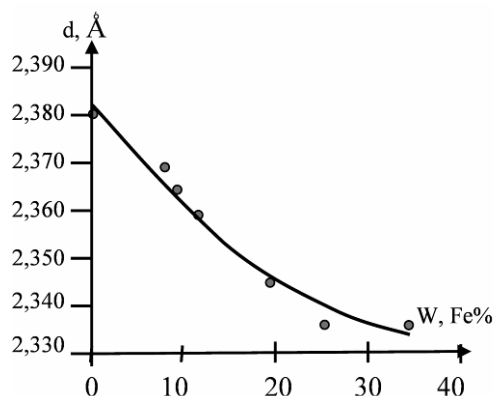


рис. 3. Межплоскостное расстояние 001 гидроксида

На основании межплоскостных расстояний для данных составов (при содержании железа от 1 до 60%) были оценены параметры решётки. Зависимость межплоскостных расстояний от состава оказывается линейной. Данный факт говорит о выполнении закона Vegarda.



## **Вклад полос перлита в предел прочности стального проката из низкоуглеродистой трубной стали**

**Порошков Артём Владимирович**

*Нижегородский Государственный Университет им. Н.И.Лобачевского*

*Чувильдеев Владимир Николаевич, д.ф.-м.н.*

*[poroshkov@nifti.unn.ru](mailto:poroshkov@nifti.unn.ru)*

В настоящее время для строительства магистральных газопроводов применяется прокат из низкоуглеродистых малолегированных сталей. Используются стали четырех типов: стали горячей прокатки, стали нормализованного проката, термически улучшенные стали и стали контролируемой прокатки. Основой для указанного деления сталей является принципиальное различие в микроструктурах, формируемых в процессе изготовления листа. Основными параметрами, характеризующими структурные различия, являются: размер и форма зерна феррита, состояние и распределение перлита в образце.

В классической модели для расчета прочности стали используется модель Пикеринга. В этой модели предполагается, что в предел прочности вносят вклад следующие структурные составляющие: размер зерна феррита, объемная доля перлита, количество легирующих элементов. Рассчитанные значения хорошо согласуются с экспериментальными данными в случае равномерной феррито–перлитной структуры. Вместе с тем, при переходе от равномерной феррито–перлитной структуры к полосчатой, различие между рассчитанным пределом прочности и его экспериментальным значением увеличивается.

Целью настоящей работы являются построение модели, позволяющей учесть вклад феррито-перлитной полосчатости в величину предела прочности и провести сопоставление результатов расчетов с экспериментальными данными.

В основе предложенной модели – подходы, развитые в теории композиционных материалов. Предполагается, что перлитные полосы являются упрочняющими волокнами упрочняющие волокна в пластичной ферритной матрице.

В качестве объекта для экспериментальной проверки модели были выбраны стали нормализованного проката и стали контролируемой прокатки. Микроструктура сталей нормализованного проката характеризуется широким интервалом полосчатости: от равномерной, до ярко выраженной полосчатой феррито–перлитной структуры. Микроструктура сталей контролируемой прокатки характеризуется широким интервалом геометрии полос: от коротки широких, до длинных узких.

Микроструктура стали выявлялась по стандартным методикам. Для определения параметров структуры (размер зерна феррита, объемная доля перлита в образце, его доля в полосах, диаметр и длину полос перлита) использовался оптический микроскоп Leica DM IRM. Предел прочности определяли по стандартным испытаниям на растяжение.

Сравнительный анализ результатов расчета предела прочности по предлагаемой модели и экспериментальных данных показал высокую эффективность предложенной модели для малоуглеродистой низколегированной трубной стали нормализованного проката и сталей контролируемой прокатки.

## **Квантово – химическое исследование структуры и свойств нанотруб на основе дигборида магния**

**Раимова Мария Алиджановна**

*Сержантова Мария Викторовна*

*Сибирский федеральный университет*

*Кузубов Александр Александрович, к.ф.-м.н.*

*[marry-ray@ya.ru](mailto:marry-ray@ya.ru)*

Применение углеводородных топлив для получения электрической, тепловой, механической энергии создаёт серьёзные экологические проблемы. Особенно сильно проблемы загрязнения окружающей среды проявляются в крупных мегаполисах. Еще одним существенным недостатком является ограниченность и истощение запасов углеводородных топлив. Для решения этой проблемы ведутся исследования во многих направлениях – ядерная энергетика, альтернативные источники энергии и т.д., одним из перспективных направлений является применение в качестве топлива водорода. Единственным продуктом сгорания водорода является вода. Одной из главных проблем применения водорода является проблема хранения и транспортировки, и эта проблема не решена и поныне.

Подходящими материалами могут стать битубелены – бинарные нанотрубы состава  $MgB_2$ , представляющие собой сдвоенные слои треугольной сетки атомов металла и графитообразной сетки атомов бора. Открытие сверхпроводимости диборида  $MgB_2$  при 39К привело к взрыву активности исследователей в этой области.

Большинство неуглеродных неорганических нанотруб синтезировано (или предсказано) для веществ или соединений, имеющих, подобно углероду, слоистые кристаллические модификации. Битубелены были смоделированы на основе диборида  $MgB_2$ , представляющего собой слоистую структуру  $AlB_2$ -типа, состоящую из графитоподобных слоев атомов бора, разделенных близко прилегающими слоями атомов магния. Атомы металла располагаются в центре гексагонов, сформированных атомами бора.

Информация о синтезе нанотруб  $MB_2$  не получена. Некоторые авторы предполагают, что одним из возможных способов получения нанотруб  $MgB_2$  станет так называемый темплатный метод, с помощью которого успешно синтезируют различные нанотубулярные композиты (НТК)– многослойные нанотрубы, содержащие слои разного химического состава. В качестве основы (матрицы) используют стабильные углеродные трубки, которые затем покрывают слоями различных веществ или соединений.

В нашей работе с помощью ab-initio расчетов исследовалась стабильность системы, используемой при дальнейших расчетах адсорбции, был проведен предварительный анализ нанотруб  $MgB_2$  без адатомов. Для этого рассчитывалась оптимальная геометрия нанотруб хиральности (10,0) и (11,11), состоящих из трех периодов нанотрубы, построенной из атомов бора, и нанотрубы (6,6) из четырех слоев. Длина полученных участков равна 11, 930 Å для (6,6), (11,11) и 15, 498 Å для (10,0). Размер участка трубы был выбран таким образом, чтобы при рассмотрении адсорбции адсорбированные атомы не взаимодействовали с атомами, находящимися в соседних ячейках. Возможны два типа конфигураций труб: металлический цилиндр расположен снаружи или внутри цилиндра, составленного атомами бора. Для трубы (6,6) исследовались структуры с обоими типами расположения металла, выявлено, что системы, в которых металл находится внутри, энергетически более стабильны. Поэтому для дальнейших расчетов использовались трубы с координацией магния внутри трубы.

Энергия и электронная структура систем исследована при различном количестве k-точек. Вдоль оси трубы обратное пространство разбивалось на 2, 4, 6, и 8 k-точек. В направлении, перпендикулярном оси трубы разбиение не проводилось. Для дальнейших расчетов выбрано наименьшее число k-точек, при увеличении которого величина полной энергии системы не меняется.

Было рассчитано значение энергии деформации, приходящейся на один атом. Полученные данные, а также данные о диаметры внутренней оболочки из атомов металла ( $D(Mg)$ ) и внешней оболочки из атомов бора ( $D(B)$ ), расстояние между двумя слоями ( $D(B-Mg)$ ) хорошо согласуются с уже известными данными и позволяют сделать вывод о более устойчивой конфигурации «zigzag» труб (6,6) и (11,11), в отличие от (10,0), при этом металлический цилиндр находится внутри цилиндра, составленного из атомов бора.

Таким образом, исходя из всех выше перечисленных условий и проведенного исследования, для дальнейших расчетов была взята нанотруба (6,6) с разбиением обратного пространства на четыре k-точки.

Для данной нанотрубы при выбранных условиях была рассчитана энергия образования связи с атомом водорода, она составляет ~ -0.3 эВ, что свидетельствует о перспективности использования данных материалов в качестве сорбентов водорода.

## **Анизотропия ангармонизма в кристаллах галогенатов натрия**

*Соболева Эльвира Гомеровна*

*Теслева Елена Павловна*

*Юргинский технологический институт Томского политехнического университета*

*Беломестных Владимир Николаевич, д.ф.-м.н.*

*[sobolevaeno@mail.ru](mailto:sobolevaeno@mail.ru)*

Галогенаты натрия, исследуемые в данной работе, относятся к типу ионно-ковалентных кристаллов, содержащих ковалентно связанные хлорат- ( $ClO_3^-$ ), бромат-ионы ( $BrO_3^-$ ) и катионы  $Na^+$ . Ацентрические кристаллы  $NaClO_3$  и  $NaBrO_3$  при стандартных условиях структурно изоморфны, принадлежат к тетраэдрическому классу кубической системы симметрии (пространственной группы)  $P_{2,3}$  и их элементарные ячейки содержат по четыре молекулы. Структура решетки кристаллов  $NaClO_3$  впервые была установлена

Захариазеном в 1929 г. и затем неоднократно подтверждалась с уточнениями. Элементарная ячейка и структура молекулы  $\text{NaClO}_3$  представлены на рис. 1.

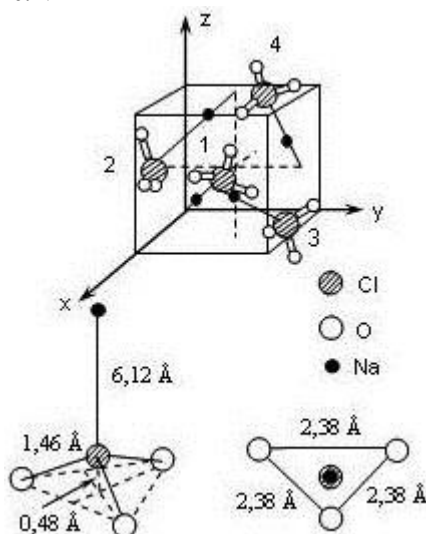


рис.1 Элементарная ячейка и структура молекулы  $\text{NaClO}_3$  [1]

Известно, что средние значения параметра Грюнайзена  $\gamma$  (меры ангармонизма межатомных взаимодействий) большинства поликристаллов находятся в интервале 0,85 – 3,53. Вместе с тем, согласно выводу из соотношения, связывающего параметр Грюнайзена с коэффициентом Пуассона  $\sigma$  [2]

$$\gamma = \frac{3}{2} \left( \frac{1 + \sigma}{2 - 3\sigma} \right) \quad (1)$$

следует, что реальной предельной величиной параметра Грюнайзена может быть  $\gamma_{\text{max}} = 4,5$  в случае  $\sigma = 0,5$ . С точки зрения физической акустики последнее означает равенство нулю скорости распространения поперечной упругой волны  $v_t$  в кристалле по формуле, определяющей  $\gamma$  через скорости звука [2]:

$$\gamma = \frac{9}{2} \left( \frac{v_L^2 - 4v_t^2 / 3}{v_L^2 + 2v_t^2} \right) \quad (2)$$

где  $v_L$  – скорость распространения продольной волны в пространственно неограниченной упругой среде.

В кубических кристаллах существуют только три направления -  $[100]$ ,  $[110]$  и  $[111]$ , в которых могут распространяться чисто продольные и чисто поперечные волны. Для получения значений  $v_L$  и  $v_t$  в указанных направлениях достаточно иметь сведения о постоянных упругости  $c_{11}$ ,  $c_{12}$ ,  $c_{44}$  и плотности вещества:

$$\rho v_{L[100]}^2 = c_{11}, \quad 2\rho v_{L[110]}^2 = c_{11} + c_{12} + 2c_{44}, \quad 3\rho v_{L[111]}^2 = c_{11} + 2c_{12} + 4c_{44}, \quad (3)$$

$$\rho v_{t[100]}^2 = c_{44}, \quad 3\rho v_{t[111]}^2 = c_{11} - c_{12} + c_{44}, \quad (4)$$

$$\rho v_{t[110]}^2 = c_{44} \text{ (волна поляризована в направлении } [0\bar{0}1]), \quad (5)$$

$$2\rho v_{t_2[110]}^2 = c_{11} - c_{12} \text{ (волна поляризована в направлении } [1\bar{1}0]). \quad (6)$$

В таблице приведены параметры Грюнайзена в особых направлениях в кристаллах галогенатов и галогенидов натрия при стандартных условиях.

Вещество	Направление в кристалле									
	[100]			[110]				[111]		
	$v_L$	$v_t$	$\gamma$	$v_L$	$v_t$	$\gamma_1$	$\gamma_2$	$v_L$	$v_t$	$\gamma$
NaBr	3576	1792	1,993	3381	2140	1,803	1,163	3313	2030	1,284
NaBrO <sub>3</sub>	4046	2156	1,783	3931	2358	1,682	1,361	3892	2293	1,426
NaCl	4851	2472	1,936	4583	2939	1,741	1,115	4490	2793	1,228
NaClO <sub>3</sub>	4499	2209	2,06	4228	2691	1,852	1,144	4135	2542	1,272

Отсюда видно, что как в галогенатах, так и в галогенидах натрия при стандартных условиях выполняется неравенство:  $\gamma_{2[110]} < \gamma_{[111]} < \gamma_{1[110]} < \gamma_{[100]}$ . Такая ситуация, на наш взгляд, связана с тем, что для всех приведенных кристаллов фактор упругой анизотропии  $A = 2c_{44} / c_{11} - c_{12}$  меньше единицы.

Список публикаций:

[1] Беломестных В.Н., Соболева Э.Г., Теслева Е.П. Температурная зависимость акустического параметра Грюнайзена ионных кристаллов // Прогрессивные технологии и экономика в машиностроении: Труды III Всероссийской научно-практической конференции. В 2-х т. – Юрга, 19-21 мая 2005 года. – Томск: Изд. ТПУ, 2005. – Т. 2. – С. 115-117.

[2] Беломестных В.Н., Соболева Э.Г., Теслева Е.П. Акустические и упругие свойства смешанных кристаллов системы  $NaCl_xBr_{1-x}O_3$  // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2007. Т. 4. № 3. С. 94-99.

## Изучение характера агрегации углеродных частиц в сажах после гидродинамической кавитации

**Стебелева Олеся Павловна**

*Лихачев Дмитрий Сергеевич*

*Сибирский федеральный университет*

*Кулагин Владимир Алексеевич, д.т.н., Кашкина Людмила Васильевна, к.ф.-м.н.*

*[kafedra@nifti.krasnoyarsk.ru](mailto:kafedra@nifti.krasnoyarsk.ru)*

Повышенный интерес исследователей к нанообъектам вызван обнаружением у них необычных физических и химических свойств. В настоящее время уникальные физические свойства наноматериалов интенсивно изучаются.

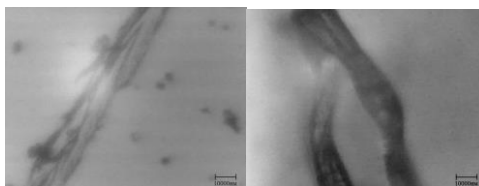
Цель данной работы: исследовать характер агрегации частиц углерода в осадках водных взвесей саж после гидродинамической кавитации.

Исследовались два типа саж. Сажи с размерами углеродных частиц до 10 нм (фуллереносодержащая сажа, алмазосодержащая сажа). Сажи с размерами углеродных частиц более 100 нм (древесная сажа, сажа полученная электродуговым методом).

В работе использовались следующие физические методы: оптическая микроскопия, рентгеновский фазовый анализ (РФА), электронный парамагнитный резонанс (ЭПР), и ядерный магнитный резонанс высокого разрешения (протонный магнитный резонанс).

Кавитация – это образование в жидкости полостей, заполненных газом, паром или их смесью, которое достигается путем локального понижения давления. Этот эффект может быть достигнут путем воздействия на жидкость устройств, которые называются кавитационными реакторами [1]. Для исследования использовался суперкавитационный миксер с частотой вращения вала 10000 об/мин. Кавитационный эксперимент проводили на водных взвешах саж (5 мг сажи на 100 мл воды, 58,5 мг сажи на 100 мл воды), время воздействия – 1 минута. После эксперимента взвеси отстаивались до образования осадка. Осадок высушивали в чашках Петри, затем изображения осадков изучали на автоматизированном оптическом микроскопе, сопряженном с компьютером. Собственное увеличение микроскопа 70 крат.

В изображениях осадков наблюдалась агрегация углеродных частиц в виде различного вида цепочек и жгутов (*рис.1*)



*рис.1 Агрегация углеродных частиц в виде цепочек и жгутов, масштаб 10000 нм*

Сравнение изображений осадков, полученных при помощи оптического микроскопа с изображениями углеродных нанотрубок, полученных с помощью электронной микроскопии и описанных в литературе [2], выявило их идентичность по форме.

По размерам они отличались на 3-4 порядка. Известно, что нанотрубки прочны и гибки. Как видно из *рис.1* у наблюдаемых в нашем эксперименте углеродных цепей, угол изгиба также мог достигать 180 градусов.

Кроме цепочечных структур, были обнаружены также сетчатые структуры (*рис.2*).

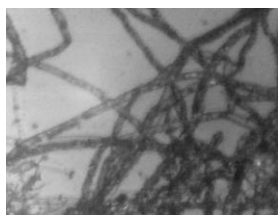


рис. 2 Агрегация углеродных частиц в виде сетчатых структур

Анализ состава изучаемых саж методом РФА показал, наличие в исходных сажах различных примесей. В образцах с металлическими примесями после кавитационной обработки наблюдались третий тип агрегации углеродных частиц – слоистые металлизированные структуры (рис.3). Они были наэлектризованы, сильно притягивались к магниту [3].

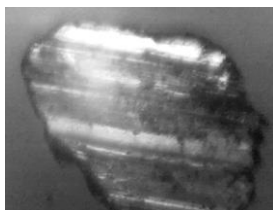


рис.3 Агрегация углеродных частиц в виде слоистых металлизированных структур

В течение 6 месяцев была изучена динамика изменения характера агрегации углеродных частиц. Обнаружено, что количество углеродных цепочек меняется с течением времени, их становится меньше, они выпрямляются: исчезают изгибы, различного вида деформации. Сетчатые образования расплываются, как бы «размазываются» на подложке. Таким образом, цепочечные и сетчатые структуры углерода являются метастабильными состояниями.

После кавитационного воздействия форма ЭПР-спектров изменялась, что может быть следствием некоего нового структурообразования. Это предположение подтверждается данными оптической микроскопии.

Методом ЯМР высокого разрешения было показано, что в водной сажевой взвеси после гидродинамической кавитации не образуются водорастворимые углеводороды. Спектр ЯМР высокого разрешения отфильтрованной водной сажевой взвеси по форме был подобен спектру ЯМР чистой воды.

Список публикаций:

[1] Л. И. Мальцев, Н. В. Малых, В. М. Петров, Г. Н. Санкин, В. С. Тесленко. Пузырьковая кавитация и ее использование в технологиях / *High speed hydrodynamics and Numerical Simulation: Proceedings of the Third International Summer Scientific Workshop*. – Kemerovo: ИИТ, 2006. С. 155-160.

[2] Раков Э.Г. Нанотрубки и фуллерены. М.: Логос. – 2006.

[3] Л. В. Кашкина, В. А. Кулагин, Э. А. Петраковская, А. Б. Гераськин. Явление графитизации при кавитационных воздействиях на водную эмульсию фуллереносодержащей сажи / *Труды Красноярского технического университета*, № 2-4, 2006, С. 251-257.

## **Влияние нанокристаллической структуры сплава АМгб на кинетическую ионно-электронную эмиссию**

**Ушанова Элина Артуровна**

**Зубаиров Линар Раисович**

*Уфимский государственный авиационный технический университет*

*Институт проблем сверхпластичности металлов РАН*

*Зубаиров Линар Раисович, к.ф.-м.н.*

*[elinaushanova@rambler.ru](mailto:elinaushanova@rambler.ru)*

Нанокристаллические (НК) материалы привлекают повышенное внимание исследователей в связи с тем, что их свойства существенно отличаются от свойств обычных крупнозернистых материалов. Однако, несмотря на многочисленные исследования, физическая природа специфического поведения таких материалов остается до конца не выясненной. Границы зёрен в НК материале находятся в специфическом неравновесном состоянии, поэтому можно ожидать различие свойств системы электронов в НК металле и металле в крупнозернистом состоянии.

В данной работе была исследована зависимость вольтамперной характеристики кинетической ионно-электронной эмиссии от микроструктуры в сплаве АМгб. Эти свойства материалов важны при их

использовании в различных электронных приборах, например, в ионных источниках с холодным катодом.

В качестве исследуемого материала выбран алюминиевый сплав АМг6, который используется в холодных катодах ионных источников. НК структура в сплаве АМг6 была сформирована с помощью интенсивной пластической деформации до истинной логарифмической степени  $\epsilon=4-7$  методом кручения под квазигидростатическим давлением. Полученные образцы подвергали отжигу при различных температурах в течение 30 минут. Измерения микротвердости образцов проводились с помощью приставки МНТ-10 и оптического микроскопа Axiovert 100A, исследования микроструктуры - на электронном просвечивающем микроскопе JEM-2000EX. Исследование кинетической ионно-электронной эмиссии проводилось на экспериментальной газоразрядной ячейке, где в качестве рабочего газа использовался аргон.

В результате интенсивной пластической деформации кручением в сплаве АМг6 сформировалась НК фрагментированная структура со средним размером фрагментов 100 нм, имеющих большеугловые разориентировки. Последующий отжиг привел к возврату в границах и объеме фрагментов, сопровождающемуся релаксацией внутренних напряжений, трансформации фрагментированной структуры сплава в равновесную зёрнистую рекристаллизацией. Изменения микротвердости исследуемых образцов коррелируют с их структурными изменениями. Обнаружено, что формирование НК структуры в сплаве АМг6 приводит к увеличению силы тока кинетической ионно-электронной эмиссии по сравнению со сплавом в крупнозернистом состоянии. Проведенные исследования открывают перспективы использования эффективных холодных катодов из НК материалов.

## **Взаимосвязь степени кристалличности и физико-механических свойств ПАН нити**

*Фазлитдинова Альфия Габдиловна*

*Павлухина Оксана Олеговна*

*Челябинский государственный университет*

*Саунина Светлана Ивановна, к.ф.-м.н.*

*[fazlitdinovaag@mail.ru](mailto:fazlitdinovaag@mail.ru)*

Углеродные волокна (УВ) являются одним из основных видов армирующих элементов, применяемых для создания композитных материалов с высокими прочностными характеристиками. В настоящее время широкое распространение в качестве сырья для изготовления УВ получили полиакрилонитрильные (ПАН) волокна. Структура и свойства исходной ПАН нити во многом определяют физико-механические характеристики конечного углеродного волокна.

В работе определяли линейную однородность структуры комплексной ПАН нити, состоящей из 300 филаментов, методом рентгеноструктурного анализа (дифрактометр D8 ADVANCE, фильтрованное  $\text{CuK}\alpha$ -излучение), а также измеряли линейную плотность, прочность и относительное удлинение при разрыве. Исследования выполнены на отрезках комплексных нитей, сформированных фильерами, расположенными в различных точках осадительной ванны. Общая длина семи отрезков нитей составила 57 000 м. Степень кристалличности материала ПАН нити рассчитывали основываясь на модели аморфно-кристаллической структуры волокна.

Установлено, что степень кристалличности материала ПАН волокон, сформированных фильерами 1 и 7, достаточно постоянная и равна 64 и 63%, соответственно. В то же время степень кристалличности ПАН нити, сформированной остальными фильерами, не является постоянной величиной по длине, что указывает на то, что условия кристаллизации прядильного раствора во времени заметно изменялись.

Было установлено, что степень кристалличности ПАН волокна изменяется от 61.1 до 65.1%. Также были определены физико-механические характеристики исследуемой ПАН нити: линейная плотность изменяется от 49.5 до 51.8 текс, разрывная нагрузка – от 413 до 560 мН/текс, и относительное удлинение при разрыве – от 12.3 до 14.5%. Возможно разброс значений степени кристалличности и физико-механических показателей связан с этапом формирования ПАН нити (неоднородное распределение полимера в прядильном растворе).

Для установления взаимосвязи кристалличности и механических показателей ПАН нити были построены зависимости степени кристалличности как функции от линейной плотности, прочности и удлинения на разрыв по всей длине исследуемой нити. Установлено, что наибольшей корреляции соответствует взаимосвязь степени кристалличности и линейной плотности (*рис.1*): наибольшим значениям степени кристалличности соответствует наибольшее значение линейной плотности.

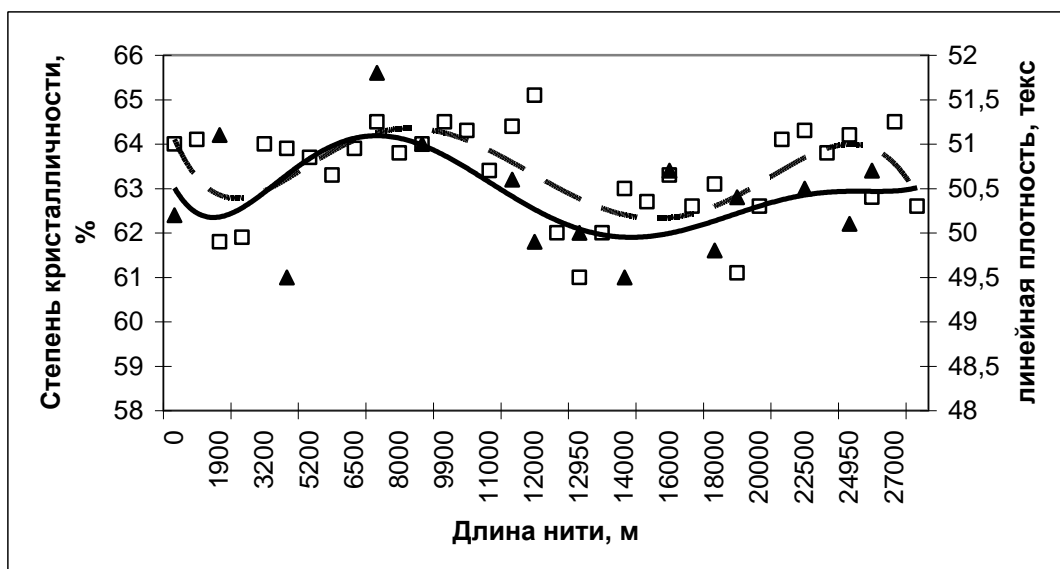


рис.1 Степень кристалличности и линейная плотность ПАН волокна по длине комплексной нити (□ - степень кристалличности, ▲ - линейная плотность, — - аппроксимация линейной плотности, - - - аппроксимация степени кристалличности)

## Динамика формирования ударной волны и ее вырождение при воздействии на металл импульсных ионных пучков с плотностью мощности $10^7 \dots 10^{10}$ Вт/см<sup>2</sup>

*Хадкевич Антон Валерьевич*

*Данейкин Юрий Викторович, Данилейко Роман Владимирович*

*Томский политехнический университет*

*Юшицин Константин Владимирович*

*[hadkevich@phtd.tpu.ru](mailto:hadkevich@phtd.tpu.ru)*

Воздействие МИП на металлы сопровождается большим количеством возбуждаемых процессов, совместное протекание которых определяет существенное модифицирование свойств материалов. Модифицированный материал при этом приобретает уникальные характеристики не только в приповерхностных слоях, но и на глубинах, превышающих пробеги частиц пучка [1].

Формирование модифицированной структуры материала за пределами области энерговыделения обусловлено процессами, протекающими во фронте ударно-волнового возмущения [2]. Следовательно, определение глубины вырождения ударной волны (УВ) в звуковую является актуальной задачей.

Исследования процессов формирования и диссипации УВ проводились с использованием разработанной упруго-гидродинамической модели системы «МИП – металл» [3]. Модель учитывает реологические свойства среды, определяющие упругость, пластичность, сжимаемость, хрупкое разрушение и других эффекты, сопровождающих ее деформирование и движение. В рамках модели использовано разработанное нами широкодиапазонное уравнение состояния системы непереходных металлов [4]. Математическая модель адаптирована к расчетам 2-х мерного поля термодинамических параметров на лагранжевой сетке и реализует метод Уилкинса с модифицированной постановкой начальных и граничных условий [5].

В сериях численных экспериментов исследованы процессы формирования и динамики импульсов механического возмущения, генерируемого МИП в металлическом поглотителе при плотностях мощности  $10^7 \dots 10^{10}$  Вт/см<sup>2</sup>. При распространении вглубь мишени амплитуда импульса интенсивно уменьшается, что связано с негидродинамическим характером его диссипации, когда упругая волна разгрузки «догоняет» пластический ударный фронт [6]. При исследовании закономерностей диссипации амплитуды импульсов механических возмущений установлено, что:

1) При  $\sigma_0 \leq 3\sigma_g$  (где  $\sigma_0$  - начальная амплитуда импульса,  $\sigma_g$  - предел упругости Гюгонио) зависимость максимальной амплитуды пластической составляющей УВ от глубины можно аппроксимировать линейной зависимостью вида:

$$\sigma(z) = \sigma_0(1 - \lambda z), \quad (1)$$

где  $\lambda$  - параметр вырождения, характеризующий скорость вырождения пластической составляющей импульса в упругую

2. Когда  $\sigma_0 > 3\sigma_g$  характер диссипации УВ усложняется. В зависимости  $-\sigma_z(z)$  появляется два характерных участка. При достижении амплитудой УВ значения  $\sigma(z) = \sigma_0 - 2\sigma_g$ , скорость диссипации УВ изменяется, а зависимость  $\sigma(z)$  на участке  $\sigma(z) < \sigma_0 - 2\sigma_g$  описывается функцией вида:

$$\sigma(z) = (\sigma_0 - \sigma_g) \exp(-\lambda_e z), \quad (2)$$

Учитывая, что  $\lambda_e$  является функцией начальной амплитуды УВ, и вводя параметр  $\alpha = \frac{\sigma_g}{\sigma_0}$ , при  $\sigma_0 > 3\sigma_g$  и  $\sigma(z) < \sigma_0 - 2\sigma_g$ , получаем, что зависимость амплитуды УВ от глубины можно описать соотношением с одним параметром  $\lambda$ :

$$\sigma(z) = \sigma_0(1 - \alpha) \left( \frac{1 - \alpha}{1 - 2\alpha} \right)^{-\frac{\lambda z}{2\alpha}}. \quad (3)$$

Полученные соотношения (1) и (3) позволяют однозначно определить глубину вырождения УВ в упругую в зависимости от ее начальной амплитуды. Так, при выполнении условия  $\sigma_0 \leq 3\sigma_g$  или при  $\alpha \geq 1/3$  из (1) с учетом  $\sigma(z_a) = \sigma_g$ , получаем:

$$z_a = \frac{1 - \alpha}{\lambda}, \quad (4)$$

В случае, если  $\sigma_0 > 3\sigma_g$  или  $\alpha < 1/3$ , глубина вырождения должна определяться из (4), т.е.:

$$z_a = \frac{2\alpha}{\lambda} \frac{\ln\left(\frac{1 - \alpha}{\alpha}\right)}{\ln\left(\frac{1 - \alpha}{1 - 2\alpha}\right)}. \quad (5)$$

В ходе численных экспериментов, получено значение параметра вырождения  $\lambda$  для меди и алюминия ( $\lambda_{Al} \approx 3.4 \text{ см}^{-1}$ , для меди  $\lambda_{Cu} \approx 5.56 \text{ см}^{-1}$ ).

Исследование диссипации УВ при вариации компонентного состава МИП показало, что присутствие тяжелой фракции в пучке приводит к увеличению глубины вырождения УВ до 10-20%. Данный факт связан с характерными особенностями пространственной топографии ударно-волнового импульса [5], формирующегося при воздействии двухкомпонентного МИП.

Таким образом, полученные зависимости позволяют прогнозировать глубину области мишени, подверженной необратимым пластическим деформациям.

Список публикаций:

- [1] Бойко В.И., Валяев А.Н., Погребняк А.Д. Модификация металлических материалов импульсными мощными пучками частиц // Успехи физических наук. – 1999. – т. 169. - №11. – с. 1243 – 1271.
- [2] Валяев А.Н., Погребняк А.Д., Плотников С.В. Радиационно-механические эффекты в твердых телах при облучении интенсивными импульсными и электронными пучками /ВКТУ. – Усть-Каменогорск, 1998. – 226 с.
- [3] Данейкин Ю.В., Юшицин К.В. Модель упругопластической среды, описывающая воздействие импульсных потоков энергии плотностью мощности  $10^8$ - $10^{10} \text{ Вт/см}^2$  на конденсированное вещество//V Всероссийская научно-техническая конференция «Механика летательных аппаратов и современные материалы». Сборник докладов. Томск, 1998.
- [4] Бойко В.И., Данейкин Ю.В., Юшицин К.В. Описание параметров состояния вещества в задачах моделирования динамики системы «МИП - металл»// Известия Томского политехнического университета, №7, 2004.
- [5] Бойко В.И., Данейкин Ю.В., Хадкевич А.В. Юшицин К.В. Влияние механизмов генерации на профиль импульса механических напряжений в металлической мишени при воздействии мощных ионных пучков// Известия Томского политехнического университета, №7, 2004.
- [6] Уилкинс М.Л. Расчет упруго-пластических течений / В сб.: Вычислительные методы в гидродинамике. – М.: Мир, 1964. – С. 212–263.



## Анализ сигнала вихретокового дефектоскопа при контроле стального изделия

*Харасов Динар Уралович*

*Загидулин Ринат Васикович*

*Башкирский государственный университет*

*Загидулин Ринат Васикович, д.т.н.*

*[Kharasov\\_DY@mail.ru](mailto:Kharasov_DY@mail.ru)*

В основе вихретокового метода контроля лежит зависимость интенсивности и распределения вихревых токов в объекте от его геометрических, электромагнитных параметров, а также взаимного расположения вихретокового преобразователя и объекта контроля [1].

Нами была рассмотрена возможность определения формы дефекта сплошности металла по виду сигнала вихретокового дефектоскопа. Объектом исследования были две ферромагнитные пластины из стали 10 с дефектами сплошности типа трещин и цилиндрического сверления. На наружную поверхность пластин нанесли искусственные дефекты в виде поперечной трещины глубиной 1; 2; 4; 6 мм и в виде цилиндрических сверлений диаметром 2,2; 3,6; 4,2 мм и глубиной 2,3; 4,5; 1,6 мм. Измерения проводили вихретоковым дефектоскопом ВД-12 НФМ. Перед измерением производили размагничивание исследуемых образцов.

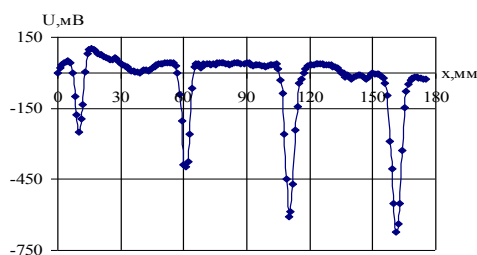


рис.1. Зависимость сигнала вихретокового дефектоскопа ВД – 12 НФМ от глубины дефектов типа трещины в стальной пластине

На рис.1 показан экспериментально полученный сигнал вихретокового дефектоскопа ВД – 12 НФМ от поверхностного дефекта типа трещины. Видно, что над поверхностным дефектом типа трещины сигнал вихретокового дефектоскопа имеет минимум.

Полученные экспериментально данные согласуются с результатами теоретических расчетов, которые показали, что плотность вихревых токов, индуцируемых в металле ВТП, пропорциональна величине удельной электропроводности металла. Удельная электропроводность в области расположения поверхностного дефекта равна нулю и силовые линии электрического поля обтекают грани дефекта, которые являются препятствием для линий вихревого тока в металле. Это обстоятельство приводит к резкому снижению величины вихревых токов в металле, следовательно, сигнала ВТП над поверхностным дефектом сплошности.

Исследования показали, что форма сигнала ВТП существенно зависит от формы поверхностного дефекта сплошности, точнее, от соотношения диаметра измерительной катушки (диаметра сердечника) ВТП и протяженности дефекта сплошности вдоль поверхности контроля.

На рис.2 показаны экспериментально полученные сигналы вихретокового дефектоскопа ВД – 12 НФМ от поверхностных дефектов в виде цилиндрических сверлений в стальной пластине. Видно, что форма сигнала над поверхностным дефектом в виде сверления существенно отличается от формы сигнала над трещиной, а именно, над дефектом сплошности сигнал принимает максимальное значение.

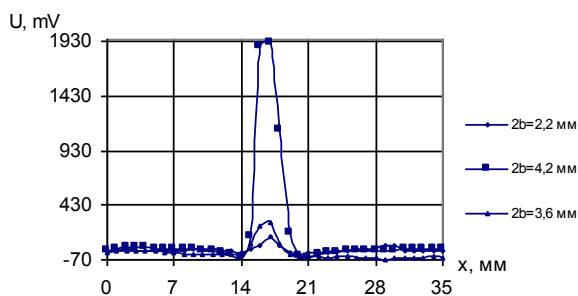


рис.2. Зависимость сигнала вихретокового дефектоскопа ВД – 12 НФМ от линейных размеров дефектов типа цилиндрических сверлений в стальной пластине

Это обстоятельство объясняется тем, что силовые линии электрического поля в металле с дефектом сплошности типа цилиндрического сверления являются деформированными, но замкнутыми, что приводит к увеличению концентрации вихревых токов при приближении ВТП к дефекту сплошности.

Таким образом, установлено, что вид сигнала вихретокового дефектоскопа содержит информацию о форме дефекта сплошности, по которой можно отнести дефект сплошности к цилиндрическому сверлению или к трещине с большой протяженностью.

Список публикаций:

[1]. Шкатов П.Н., Ключев С.В. Математическое моделирование воздействия дефектов сплошности на вихретоковые преобразователи. – Контроль. Диагностика. № 6, 2005, стр. 17-21.

## **Влияние температурно-скоростных условий деформации на формирование ультрамелкозернистой структуры сплава Zr-2,5%Nb**

**Хасанова Гузель Флюровна**

*Валиахметов Олег Рязович*

*Уфимский государственный авиационный технический университет*

*Мулюков Радик Рафикович, д.ф.-м.н.*

*[guzelechka-86@mail.ru](mailto:guzelechka-86@mail.ru)*

Основным конструкционным материалом активных зон реакторов являются сплавы циркония, характеризующиеся незначительным паразитным захватом нейтронов и высокими антикоррозионными свойствами. Эксплуатационные свойства циркониевых изделий определяются структурой сплава, которая формируется в процессе производства. При этом наиболее оптимальный комплекс свойств обеспечивает однородная мелкозернистая микроструктура. Известно, что эффективным способом повышения однородности микроструктуры в металлах и сплавах является деформационная обработка, вызывающая развитие динамической рекристаллизации. Однако структурные изменения в процессе динамической рекристаллизации в циркониевых сплавах на сегодняшний день изучены недостаточно систематически. В соответствии с этим было проведено исследование влияния условий горячей деформации в  $(\alpha+\beta)$ -области на эволюцию микроструктуры и механическое поведение сплава Э125 с исходной крупнозернистой пластинчатой структурой.

Для изучения процесса формирования ультрамелкозернистой структуры в сплаве Zr-2,5%Nb проводили изотермическую деформацию при 800 С. Механическое поведение сплава Zr-2,5%Nb исследовали при испытании на сжатие со скоростями деформации  $5 \times 10^{-3}$ ,  $5 \times 10^{-4}$  с<sup>-1</sup>. Начальные стадии пластического течения сопровождаются деформационным упрочнением и после достижения максимума напряжений течения наблюдается разупрочнение и установившаяся стадия. С увеличением скорости деформации повышаются значения напряжений течения, однако характер кривых  $\sigma$ - $\epsilon$  не меняется.

Установлено, что деформация сплава Zr-2,5%Nb в двухфазной области сопровождается процессом трансформации пластинчатой структуры в мелкозернистую равноосную с размером рекристаллизованных зерен около 2 мкм. Формирование мелкозернистой структуры обусловлено протеканием процессов динамической рекристаллизации, сопровождающихся делением пластин на фрагменты и их последующей сфероидизацией. Показано, что температурно-скоростные условия и степень деформации влияют на характеристики формирующейся структуры. Формирование мелкозернистой структуры наблюдается после степени деформации более 35%. Увеличение скорости деформации с  $5 \times 10^{-4}$  до  $5 \times 10^{-3}$  с<sup>-1</sup> приводит к уменьшению размера рекристаллизованных зерен.

Показано, что процесс динамической рекристаллизации приводит к трансформации пластинчатой структуры в глобулярную. Изотермическая деформация в двухфазной области является эффективным способом измельчения зерна.

## Исследование оптических свойств углеводородных пленок, осажденных из плазмы тлеющего разряда

Чепкасов Сергей Юрьевич

Новосибирский государственный университет

Золкин Александр Степанович, к.ф.-м.н.

[trance@gorodok.net](mailto:trance@gorodok.net)

Интерес к углеводородным пленкам, называемым алмазоподобными, объясняется не только их уникальными механическими, но и оптическими свойствами. Их относительно легко можно получать при низких температурах на подложках большой площади. Углеводородные пленки являются эффективным материалом для применения в качестве защитных, просветляющих интерференционных покрытий в приборах современной оптоэлектроники [1], светоблокирующих слоев в ЖК модуляторах света отражательного типа [2] и т.д.

В работе исследовались показатели преломления и толщины углеводородных пленок, осажденных из плазмы тлеющего разряда, а также их структура и фазовый состав. В качестве методов исследования использовались эллипсометрия и комбинационное рассеяние света.

Свойства углеводородных пленок зависят от метода их получения и от технологических параметров осаждения: времени пребывания частиц в зоне осаждения, температуры подложки, состава газовой смеси и т.д.

Осаждение осуществлялось в течение часа в плазме тлеющего разряда постоянного тока в парах этанола и ацетона. Разряд зажигался в кварцевой трубке диаметром 40 мм между анодом, на который от источника постоянного напряжения подавался потенциал, и заземленным катодом. Катод представляет собой сетку из нержавеющей стали с геометрической прозрачностью приблизительно 75 %. Осаждение проводилось при давлении паров этанола и ацетона 0,19 торр в диапазоне межэлектродных напряжений 700–1000 В. В качестве подложек использовались стекло и кремний марки КДБ-0,0025, легированный бором. Осаждение проводилось на холодные и нагреваемые подложки ( $t = 200, 400$  °С). Нагрев производился при помощи специального нагревателя, который играл роль держателя подложек. Он располагался непосредственно за катодом на расстоянии 2 см. Температура подложки измерялась при помощи термопары. Толщины и показатели преломления полученных пленок измерялись на лазерном эллипсометре LEF-752. Максимальная толщина (1580 Å) наблюдалась у пленки, осажденной в парах этанола на стеклянную подложку при температуре 200 °С и напряжении на электродах 1000 В. Ее показатель преломления 1,8. Максимальный показатель преломления (2,2) у пленки, полученной на кремнии при температуре 400 °С и напряжении 1000 В. Из всех образцов были выбраны, полученные на кремнии, для определения их структуры и фазового состава методом комбинационного рассеяния света. Использовался спектрометр ДФС-52 (ИФП СО РАН). Среди выбранных образцов были пленки, осажденные в парах этанола с нагревом и без нагрева подложки и пленки, осажденные в парах ацетона также с нагревом и без нагрева. Показан спектр комбинационного рассеяния пленки, полученной в парах этанола при температуре кремниевой подложки 400 °С (рис.1). Спектр совпал со спектром стеклоглуглерода, приведенном в [3], который является алмазоподобным.

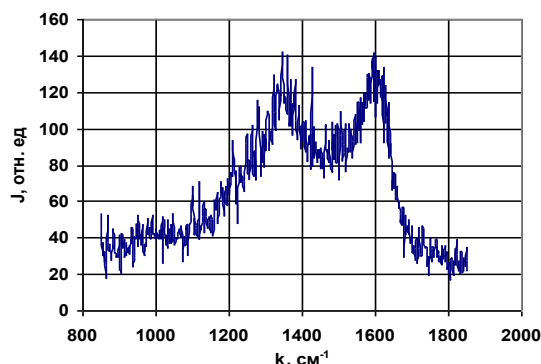


рис. 1 Спектр КРС пленки, осажденной на кремний при температуре 400 °С

Список публикаций:

- [1] Влияние условий осаждения на просветляющие свойства алмазоподобных углеродных пленок для солнечных элементов на основе кремния / Н. И. Клей, В. Г. Литовченко, А. Н. Лукьянов и др. // ЖТФ. 2006. Т. 76. Вып. 5. С. 122–126.
- [2] Кошица Е. А., Онохов А. П. Применение поглощающих пленок  $\alpha$ -C:H в жидкокристаллических модуляторах света отражательного типа // ЖТФ. 1999. Т. 69. Вып. 3. С. 80–81.
- [3] Диагностика микроструктуры и фазового состава алмазных и алмазоподобных пленок / В. Д. Андреев, Т. А. Начальная, Ю. И. Созин, В. А. Семенович // Техника средств связи. 1991. Вып. 4. С. 18–30.

## Изменения линейных размеров полиакрилонитрильной нити

*Чуриков Виталий Владимирович*

*Кондаков Сергей Анатольевич*

*Челябинский государственный университет*

*Саунина Светлана Ивановна, к.ф.-м.н.*

*[Briket\\_85@mail.ru](mailto:Briket_85@mail.ru)*

Исходным сырьем для получения углеродных волокон могут служить полиакрилонитрил (ПАН), мезофазный пек, вискоза. Углеродные волокна на основе ПАН являются предпочтительными для армирования композиционных материалов с превосходной удельной прочностью и жесткостью в сочетании с малой массой.

Процесс получения углеродных волокон из полиакрилонитрильных включает формирование исходного волокна, термоокислительную стабилизацию, высокотемпературную обработку (карбонизация и графитация).

Одной из важных стадий превращения полиакрилонитрильных (ПАН) волокон в углеродные является термоокислительная стабилизация. Сущность этой стадии заключается в том, чтобы превратить ПАН волокна в неплавкие структуры. Проводится она, главным образом, в воздушной среде, где кислород выступает в качестве агента, способствующего реакциям превращения. [1,2].

В ходе термоокислительной стабилизации ПАН волокна претерпевают усадку, которая, как считают, состоит из двух процессов — так называемой физической, или первичной, усадки и протекающей вслед за ней химической, или вторичной. Усадочные процессы на стадии окислительной стабилизации ПАН оказывают большое влияние на конечные механические свойства получаемого углеродного волокна, поскольку в ходе усадки изменяется ориентация макромолекул полимера и некоторые другие свойства волокон. Поэтому выяснение природы усадочных процессов и их механизмов при производстве углеродных волокон из ПАН является весьма важной задачей. Величина усадки и скорость ее развития зависят от состояния структуры ПАН волокон, степени напряженности структуры, задаваемой при ориентационном вытягивании волокон, содержания остаточной влаги и растворителя в волокне и других фактором. Поэтому целью данной работы является изучение влияния условий получения полиакрилонитрильной нити на величину усадки, претерпеваемую нитью в процессе стабилизации.

Исходную полиакрилонитрильную нить получали при различных условиях, изменяя концентрацию от 40 до 48%, температуру от 6 до 14°C и скорость циркуляции раствора в осадительной ванне от 600 до 2100 л/час. Далее полученные волокна подвергались ориентационной вытяжке в условиях изотермического обжига при температуре 230°C и нагрузке 30 грамм. Режимы дальнейшей высокотемпературной обработки до температуры 2400°C были одинаковыми. Рентгеноструктурный анализ полученных образцов проводился на дифрактометре ДРОН-3 (CuK $\alpha$  – излучение). Параметры структуры определили обработкой профиля дифракционного максимума по стандартной методике. Межплоскостные расстояния  $d_{002}$  определяли по положению центра тяжести дифракционного максимума с использованием формулы Вульфа-Брэгга.

У образцов ПАН-нити, полученных при одинаковых концентрации 40% и температуре 6°C, но при различной скорости циркуляции осадительного раствора наблюдается плавное развитие усадочных процессов. При повышении температуры осадительного раствора с 6 до 14°C имеет место резкий характер развития усадки, имеющий относительно высокие значения вытяжки и усадки. При этом наблюдается снижение выхода годной продукции как на промежуточной стадии окисления, так и на стадии графитации. Отмечено, что подобное повышение температуры сопровождается уменьшением модуля упругости и разрывной прочности с 147 до 140 ГПа с 1,53 до 1,43 ГПа соответственно.

В группе концентрации осадительного раствора 48% образцы, полученные при температуре 14°C, а также при температуре 6°C и скорости 2100 л/час, показали ровный ход развития усадочных процессов. В противовес этому у образца ПАН-нити, полученной при температуре 6°C и скорости 600 л/час, усадка протекает довольно резко. У последнего образца отмечаются наибольшие величины вытяжки и усадки в пределах этой группы концентрации раствора. Вместе с тем падает выход годной продукции, и происходит снижение модуля упругости с 153 до 143 ГПа.

У образцов, соответствующих самому низкому выходу годной продукции, наибольшие значения вытяжки и усадки имеет полученный при концентрации 40%, температуре 14°C и скорости циркуляции осадительного раствора 600 л/час. Это выражается в более низкой разрывной прочности. Таким образом, было уставлено влияние условий синтеза ПАН-нити на усадочные явления.

Список публикаций:

1. *Калашиник А.Т., Серков А.Т. Механизмы преобразования акриловых волокон в процессе термоокислительной стабилизации. //Химические волокна, 5. 2000.С-46-53*
2. *Fitzer E., Frons W., Heine M. // Carbon. 1986. V. 24. № 4. P. 387-395.*

## **Влияние термо-механических обработок на физико-механические свойства новых микрокристаллических сплавов системы Al-Si-Cu**

**Шотин Сергей Викторович**

*Нижегородский государственный университет им. Н.И.Лобачевского*

*Грязнов Михаил Юрьевич, к.ф.-м.н.*

*[Shotin@nifti.unn.ru](mailto:Shotin@nifti.unn.ru)*

Разработаны новые микрокристаллические поршневые сплавы Al - 12% вес. Si – 2,0% вес. Cu (далее «Al-12%Si») и Al - 18% вес. Si – 1,5% вес. Cu (далее «Al-18%Si»). Микрокристаллические материалы получены по технологии равноканального углового прессования. В результате прессования в сплавах была получена однородная микрокристаллическая структура со средним размером зерна в Al - матрице не более 10 мкм и размером кремниевых частиц не более 20 мкм. Проведены детальные исследования микротвердости, микроструктуры и механических свойств сплавов в литом и микрокристаллическом состояниях.

Исследования микротвердости и обработка полученных данных были проведены на микротвердомере «Duramin-5» «Struers» с использованием специально разработанного программного обеспечения «Microhardnesstest 7MP». Структурные исследования проводились на оптическом металлографическом микроскопе «LEICA DM IRM» и сканирующем электронном микроскопе «Jeol» JSM-6490. Механические испытания на растяжение были проведены на разрывных машинах «Tinius Olsen H25KS» и 2167 P-50.

В ходе исследований получены следующие результаты:

Разработаны новые поршневые микрокристаллические алюминиевые сплавы системы Al-Si-Cu. Сформирована микрокристаллическая структура со средним размером зерна 7 мкм.

Впервые обнаружен эффект повышения пластичности и одновременного повышения прочности микрокристаллического сплава Al - 18% Si при комнатной температуре: удлинение до разрыва составило 15-20 %, что в 4-5 раз выше значений удлинений, получаемых на литых образцах этого сплава. В то же время предел прочности сплава составляет 230 МПа против 190 МПа в литом сплаве. Также обнаружен эффект повышения пластичности микрокристаллического сплава Al-12%Si при комнатной температуре без существенного снижения прочности: удлинение до разрушения при комнатной температуре составляет 20 %, что в 4 раза превышает показатели пластичности литого сплава Al-12%Si.

Обнаружена корреляция изменения величины микротвердости и изменения основных прочностных характеристик сплавов системы Al-Si-Cu после термических обработок.

Показано, что основной вклад в изменение величины микротвердости сплавов системы Al-Si-Cu вносят: частицы кремния, дисперсионные частицы  $\text{CuAl}_2$ , твердый раствор Cu в Al-матрице.

На основе анализа результатов исследований микротвердости разработаны оптимальные режимы термообработки сплавов системы Al-Si-Cu необходимые для повышения их прочности. Показано, что максимальный эффект упрочнения (порядка 25 %), обусловленный процессом образования мелких дисперсионных частиц фазы  $\text{CuAl}_2$ , достигается при многостадийной термообработке сплава (закалка 500 °C и старение при 200 °C).

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 06-08-01119) и Программы "Фундаментальные исследования и высшее образование" (BRHE) Министерства образования и науки РФ и Американского Фонда Гражданских Исследований и Развития CRDF (грант # RUX0-001-NN-06/BP3C01).

## **Исследование химического состава поверхности наночастиц серебра методом РФЭС**

**Юдин Андрей Леонидович**

*Яцына Николай Александрович, Токмаков Иван Васильевич, Чехова Ксения Николаевна*

*Кемеровский государственный университет*

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

*[andrey@kemsu.ru](mailto:andrey@kemsu.ru)*

Основной тенденцией в современных научных направлениях является изучение свойств наноструктур и теорий явлений в малых объектах (низкоразмерных системах). Уникальность свойств и характеристик таких объектов во многом определяется их поверхностным или межфазным составом. В свою очередь, протекающие на поверхности наноструктур процессы играют значительную роль в высокодисперсных системах – адсорбентах

и катализаторах, композиционных материалах, пленочных системах. Наноразмерные частицы целого ряда металлов (Ag, Pd, Ni, Cu), нанесенные на различные поверхности проявляют избирательную эффективность в каталитических процессах превращений углеводов и в реакциях конверсии газов.

Среди физико-химических методов исследования состава поверхности метод рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) занимает особенное место. Благодаря поверхностной чувствительности с его помощью можно получать ценную информацию как о природе (электронном строении) самих металлических частиц, а также идентифицировать состояние адсорбентов. В связи с этим, в данной работе методом РФЭС было выполнено исследование химического состава золей серебра, восстановленных из ионов металла в растворе, до после адсорбции кислорода и термообработки.

Метод получения частиц дисперсий серебра заключался в восстановлении нитрата серебра гидрохиномом, в присутствии лимоннокислого натрия, желатины, тетрабората и гидроксида натрия. Согласно электронно-микроскопическим исследованиям средний размер серебряных частиц дисперсий варьировался от 500 до 800 Å. Порошки золей серебра подвергались адсорбции кислорода при атмосферном давлении, путем напуска газа в камеру подготовки спектрометра. Последующий нагрев образцов до 570 К осуществлялся как в камере подготовки, так и в муфельной печи. После каждого этапа обработки проводилась запись РФЭС спектров.

Обзорные РФЭС-спектры позволили выявить РФЭС-линии: Ag 3d, Ag 4d, C 1s, O 1s, а также Оже-серии KLL для углерода и кислорода и серии MVV серебра. Дополнительно были выделены линия Na 1s и N 1s, отвечающая нитрогруппе NO<sub>3</sub>, что объясняется адсорбцией соединений цитратов и нитратов натрия из раствора синтеза частиц серебра. В результате адсорбции кислорода и термических воздействий установлено образование карбонильных и карбоксильных групп. При этом при повышении температуры обработки до 570 К наблюдается разложение соединений окислов углерода.

Для исследованных низкоразмерных систем частиц серебра наблюдались сдвиги основной 3d линии в сторону больших значений энергии связи, чем для массивного металла (368,2 эВ). По результатам экспериментов для энергии связи уровня 3d<sub>5/2</sub> золей серебра в области размеров 50-80 нм можно принять значение равное 368,4 эВ. Был применен метод расчета химического сдвига для золей серебра относительно металла, основанный на комплексном учете изменения энергии связи 3d<sub>5/2</sub>-уровня серебра, Оже-линии M<sub>5</sub>VV, модифицированного α'-фактора Вагнера, распределения плотности 4d-состояний серебра, положения уровня Ферми относительно потолка валентной зоны и наличия релаксации в конечном состоянии. Показана возможность дифференцирования металлической и ионной фаз золей серебра с использованием анализа формы 3d и Оже-линий. Ширина 3d-линий серебряных золей превосходит ширину линий для нанесенных металлических частиц серебра и массивного металла. Проявление подобных качеств определяется в основном условиями получения дисперсий и существованием нескольких фаз серебра, отличных по валентности. Таким образом, установлено отклонение электронных свойств золей серебра наноразмеров от свойств массивного металла, характеризующееся ухудшением проводимости, что проявляется в эффекте дифференциальной подзарядки, изменении структура валентной 4d-зоны и Оже-параметра, а также смещением энергии связи 3d-уровня в сторону больших величин.

Был идентифицирован химический состав поверхности наночастиц серебра и установлена природа хемосорбированного в диапазоне 300-570 К кислорода. Полностью избавиться от вклада "камерного остаточного" кислорода в камере не удастся. В спектрах исходных золей серебра наблюдался широкий и довольно интенсивный пик O 1s с максимумом в области ~ 532–533 эВ. Исходя из этого все спектры O 1s были проанализированы в разностной форме, т.е. после вычитания из конечного спектра O 1s спектра фонового кислорода.

Анализ сигнала O 1s в области 529-530 эВ позволяет утверждать об образовании на поверхности серебряных частиц (> 500 Å) при комнатных температурах адсорбции кислорода молекулярно хемосорбированная форма кислорода O<sub>2адс</sub> с E<sub>св</sub> 530 эВ. . Нагрев до T = 370 К, а также переход нанесенным частицам серебра приводят к трансформации этой формы в атомарную форму кислороду O<sub>2</sub><sup>-</sup> или O<sup>-</sup> (E<sub>св</sub> 529 эВ) с более ионным характером связи с атомами серебра. При повышении температуры отжига >420 К указанные состояния кислорода вырождаются.