



**ТОМСКИЙ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ**

ТДСУР | TUSUR
UNIVERSITY
Томский государственный университет
систем управления и радиоэлектроники



**ТОМСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
МЕДИЦИНСКИЙ ЦЕНТР
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК**



Национальному
исследовательскому
**Томскому
государственному
университету 140 лет**

ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ НАУК

Сборник научных трудов
XV Международной конференции студентов, аспирантов
и молодых ученых

РОССИЯ, ТОМСК, 24 – 27 апреля 2018 г.

Том 1. Физика

PROSPECTS OF FUNDAMENTAL SCIENCES DEVELOPMENT

Abstracts
XV International Conference of Students
and Young Scientists

RUSSIA, TOMSK, April 24 – 27, 2018

Volume 1. Physics

КОНФЕРЕНЦИЮ ПОДДЕРЖИВАЮТ:



Совет при Президенте Российской Федерации
по науке и образованию
Координационный совет по делам молодежи
в научной и образовательной сферах



издательство
МАНН, ИВАНОВ И ФЕРБЕР



Редакционно-
издательский дом
"ПостНаука"



**Young
Scientists Tomsk**

ПРОГРАММА ПОВЫШЕНИЯ КВАЛИФИКАЦИИ

САЕ «Институт «Умные материалы и технологии» Национального исследовательского Томского государственного университета приглашает дипломированных специалистов пройти программу повышения квалификации

«СОВРЕМЕННЫЕ ТЕНДЕНЦИИ В ПОЛУЧЕНИИ И ИССЛЕДОВАНИИ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ»

Направление 04.00.00 Химия

Модульная структура обучения:

Модуль 1: Новые подходы в получении и исследовании функциональных материалов

Модуль 2: Методы исследования структуры, состава и физико-химических свойств функциональных материалов

Профессиональные компетенции, формируемые в результате обучения:

- способностью проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты (ПК-1);
- владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии (ПК-2);
- готовностью использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований (ПК-3);
- способностью участвовать в научных дискуссиях и представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати) (ПК-4).

Обучение в рамках образовательной программы реализуют ученые с высокой научной квалификацией из ведущих научных организаций РФ и зарубежья. практическая часть курса проводится с использованием современного аналитического и исследовательского оборудования Томского регионального центра коллективного пользования и на базе структурных подразделений САЕ Институт «Умные материалы и технологии».

КОНТАКТЫ

Руководитель программы: Курзина Ирина Александровна, д.ф-м.н., профессор кафедры физической и коллоидной химии ХФ, директор Института «Умные материалы и технологии» НИ ТГУ, kurzina99@mail.ru.

Координатор программы: Сюсюкина Владислава Александровна, менеджер учебного офиса САЕ «Институт «Умные материалы и технологии» НИ ТГУ, syusyukina_vlada@mail.tsu.ru.

АДРЕС

Россия, ул. А. Иванова, 49, г. Томск, Томская обл., 634028 (Химический факультет ТГУ)

Национальный исследовательский Томский политехнический университет
Национальный исследовательский Томский государственный университет
Томский государственный архитектурно-строительный университет
Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники
Томский национальный исследовательский медицинский центр РАН

ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ НАУК

Том 1. Физика

Сборник научных трудов
XV Международной конференции студентов, аспирантов
и молодых ученых

24–27 апреля 2018 г.

PROSPECTS OF FUNDAMENTAL SCIENCES DEVELOPMENT

Volume 1. Physics

XV International Conference of students, graduate students
and young scientists

April 24–27, 2018

Томск 2018

УДК 501:004 (063)

ББК 72:32.81л0

П27

Перспективы развития фундаментальных наук : сборник трудов
П27 XV Международной конференции студентов, аспирантов и молодых
ученых (Томск, 24–27 апреля 2018 г.) : в 7 т. – Т. 1: Физика / под ред.
И.А. Курзиной, Г.А. Вороновой. – Томск : Издательский Дом Томского
государственного университета, 2018. – 369 с.

ISBN 978-5-94621-724-8 (отд. кн.)

ISBN 978-5-94621-723-1

Сборник содержит труды участников XV Международной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Перспективы развития фундаментальных наук», представленные на секции «Физика».

Для студентов, аспирантов, молодых ученых и преподавателей, специализирующихся в области физики конденсированного состояния, физики поверхности, физики ускорителей, водородной энергетики, геофизики, а также моделирования физических процессов.

УДК 501:004 (063)

ББК 72:32.81л0

Редакционная коллегия

И. А. Курзина, доктор физико-математических наук, доцент;

Г. А. Воронова, кандидат химических наук, доцент;

С. А. Поробова.

ISBN 978-5-94621-724-8 (отд. кн.)

ISBN 978-5-94621-723-1

© Авторы, 2018

СОДЕРЖАНИЕ

DFT STUDY OF HYDROGEN ADSORPTION ON PURE AND FUNCTIONALIZED CARBON NANOTUBES E.V. Anikina	12
SHAPE MEMORY EFFECT PARAMETERS IN TINI-BASED ALLOYS WITH SILVER G.A. Baigonakova, E.S. Marchenko, D.V. Barashkova	15
GENERATION OF THZ RADIATION BY SEQUENCE OF RING BEAMS IN MULTILAYER DIELECTRIC WAVEGUIDE K.R. Mukhamedgaliyev, N.A. Lesiv	18
MITIGATION STRATEGY AGAINST NUCLEAR AND RADIATION TERRORISM IN NIGERIA A.C. Nnodi, S.V. Belyavsky, R.J. Soja	21
ROLE OF LOCALIZED STATES DUE TO NANOPARTICLE INCLUSION IN FORMATION OF ELECTRICAL CONDUCTIVE PROPERTIES OF NANOCOMPOSITE MATERIALS N.S. Dyuryagina	24
THE ROLE OF ELECTROPHORETIC DEPOSITION METHOD IN THE CREATION OF A BIOCOMPOSIT BASED ON HYDROXYAPATITE LAYERS AND SILVER NANOPARTICLES A.A. Sharonova	27
ИЗМЕНЕНИЕ СТРУКТУРЫ И ФАЗОВОГО СОСТАВА В МАТЕРИАЛЕ СВАРНОГО ШВА СТАЛИ 12Х18Н10Т ПОД ДЕЙСТВИЕМ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ Н.В. Абабков, Е.Л. Никоненко, Н.А. Попова, А.Н. Смирнов	30
ВЛИЯНИЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ КРАТКОВРЕМЕННЫХ ОТЖИГОВ НА СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ СОСТОЯНИЯ СТАБИЛЬНОЙ АУСТЕНИТНОЙ СТАЛИ ПОСЛЕ ХОЛОДНОЙ ДЕФОРМАЦИИ С.А. Аккузин	33
ВЛИЯНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ НА ПРОЦЕССЫ КОНСОЛИДАЦИИ КЕРАМИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ОКСИДА ИНДИЯ-ОЛОВА Т.Р. Алишин, О.С. Толкач	36
ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТЕЙ ПОВЫШЕНИЯ РАБОЧИХ ТЕМПЕРАТУР ФЕРРИТНО-МАРТЕНСИТНОЙ СТАЛИ ЭК-181 С ПОМОЩЬЮ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ К.В. Алмаева, Н.А. Полехина	39
ВОЗДУШНО-ПЛАЗМЕННАЯ РЕКОНВЕРСИЯ ГЕКСАФТОРИДА ОБЕДНЕННОГО УРАНА Е.С. Алюков, Н.В. Тундешев	42
ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРРАСОВИДНОГО РЕЛЬЕФА НА ПОВЕРХНОСТИ СТенок ПОР В БИОСОВМЕСТИМОМ ПОРИСТОМ НИКЕЛИДЕ ТИТАНА, ПОЛУЧЕННОМ СПЕКАНИЕМ С.Г. Аникеев, Н.В. Артюхова, А.С. Гарин	45
ПРОГНОСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО ИСПАРЕНИЯ КАПЕЛЬ ВОДЫ Д.В. Антонов, П.А. Стрижак	48
СТРУКТУРА ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ КАРБОНИТРИДОВ НА ПОВЕРХНОСТИ ПОРИСТОГО БИОСОВМЕСТИМОГО НИКЕЛИДА ТИТАНА, ПОЛУЧЕННОГО МЕТОДОМ СВС А.А. Арямкин, Н.В. Артюхова	51
ОСОБЕННОСТИ ИЗМЕРЕНИЯ ТЕРМОЭДС ЦИРКОНИЕВОГО СПЛАВА С НАПЫЛЕННЫМ СЛОЕМ НИКЕЛЯ А.А. Асхатов, Сюй Шупэн	54
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРСПЕКТИВНЫХ СХЕМ ОБРАБОТКИ ОБРАЗЦОВ ИЗ ЛИСТОВОГО ПРОКАТА Л.Р. Ахметшин, В.А. Красновейкин, Е.Н. Москвичев	57
ВЛИЯНИЕ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА ДЕФЕКТНУЮ СТРУКТУРУ Тl-6AL-4V М.Н. Бабихина, Р.С. Лаптев	60

МОДЕЛИРОВАНИИ ДИФФУЗИИ ВОДОРОДА ПО ГРАНИЦАМ ЗЕРЕН В ТИТАНЕ К.Б. Байтурсынов	63
ИЗМЕНЕНИЕ СМАЧИВАЮЩИХ СВОЙСТВ МЕТАЛЛОВ ПОСЛЕ ИХ ОБРАБОТКИ ЛАЗЕРНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ К.А. Батищева, А.Г. Исламова	66
ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ ИНТЕНСИВНОСТИ ИОНИЗИРУЮЩЕГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ЕМКОСТИ ПРИ ИЗМЕНЕНИИ КАЧЕСТВЕННОГО СОСТАВА РАСТВОРА С.В. Белявский	69
АНАЛИТИЧЕСКИЙ РАСЧЁТ ТРЕЩИНОСТОЙКОСТИ МАТЕРИАЛОВ ПО ДАННЫМ ИСПЫТАНИЙ МАЛОРАЗМЕРНЫХ ОБРАЗЦОВ С ШЕВРОННЫМ НАДРЕЗОМ А.А. Богданов	72
ЗАКОНОМЕРНОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ В ПРОЦЕССЕ 3D-ПЕЧАТИ ТИТАНОВЫХ СПЛАВОВ А.О. Буйлук, И.О. Акимченко	75
ВЛИЯНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ И ФАЗОВОГО СОСТАВА НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТА ZrO ₂ -MGO С БИМОДАЛЬНОЙ ПОРОВОЙ СТРУКТУРОЙ А.С. Буяков, Е.О. Васильева, Д.А. Ткачев	78
РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ПРОИЗВОДСТВА РАДИОНУКЛИДА ГЕРМАНИЯ-68 ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ОБОГАЩЁННОГО ИЗОТОПА ЦИНКА-66 НА ЦИКЛОТРОНЕ P7M Н. Вилья, Г.С. Модебадзе	81
ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ НА ОСНОВЕ РЕДКОЗЕМЕЛЬНОГО ЭЛЕМЕНТА И ПЕРЕХОДНОГО ИЛИ БЛАГОРОДНОГО МЕТАЛЛА А. Ю. Вязовская	84
АНАЛИЗ РАЗДЕЛЯЮЩИХСЯ КООРДИНАТ ДЛЯ СВОБОДНОГО УРАВНЕНИЯ КЛЕЙНА – ГОРДОНА А.В. Гайдучик	87
ИЗМЕРЕНИЕ АСИММЕТРИИ ФОТОРОЖДЕНИЯ ОТРИЦАТЕЛЬНО-ЗАРЯЖЕННЫХ ПИОНОВ ЛИНЕЙНО-ПОЛЯРИЗОВАННЫМИ ФОТОНАМИ НА ТЕНЗОРНО-ПОЛЯРИЗОВАННЫХ ДЕЙТРОНАХ В.В. Гаушштейн, Б.И. Василишин, А.Ю. Логинов	90
МОРФОЛОГИЯ МИКРОСФЕР ПОЛУЧЕННЫХ НА ОСНОВЕ АГЛОМЕРИРОВАННЫХ ЧАСТИЦ В ПОТОКЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ ПЛАЗМЫ В.В. Шеховцов, О.Г. Волокитин, Р.Е. Гафаров	93
ИССЛЕДОВАНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛЫ H ₂ S В ПОЛОСЕ ν ₂ : АНАЛИЗ ПОЛОЖЕНИЯ ЛИНИЙ, ИНТЕНСИВНОСТИ, ПОЛУШИРИНЫ П.А. Глушков	96
ОСОБЕННОСТИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ УДАРНОЙ ВОЛНЫ ЧАСТИЦ С УЧЁТОМ ИХ ОБЪЕМНОЙ ДОЛИ Н.В. Гольдина	99
О ВЛИЯНИИ УСЛОВИЙ ОСАЖДЕНИЯ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРЕМНИЙ-УГЛЕРОДНЫХ ПЛЁНОК А.С. Гренадёров	102
ДИФфуЗИОННЫЕ БАРЬЕРЫ ДЛЯ ВОДОРОДА В ПАЛЛАДИИ: РАСЧЁТЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ Е. Даньдань	105
ВНЕДРЕНИЕ ВОДОРОДА В ТИТАН ПЛАЗМЕННЫМИ МЕТОДАМИ Е.Д. Даулетханов, Чжань Тяньюань	108
ВЕРИФИКАЦИЯ РОТАЦИОННЫХ МЕТОДИК ОБЛУЧЕНИЯ НА ОСНОВЕ ПЛОСКИХ И ОБЪЕМНЫХ МАТРИЧНЫХ ДЕТЕКТОРОВ М.Г. Двуреченский, Е.С. Сухих	111
РАЗРАБОТКА МЕТОДА ПОВЫШЕНИЯ ВОДОРОДНОЙ СТОЙКОСТИ ТИТАНОВОГО СПЛАВА VT6 Дин Цзыи, В.Н. Кудияров	114

ОПТИМИЗАЦИЯ КОНФИГУРАЦИИ АКТИВНОЙ ЗОНЫ РЕАКТОРА ИРТ-Т ДЛЯ ОБЛУЧЕНИЯ СЛИТКОВ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КРЕМНИЯ БОЛЬШОГО ДИАМЕТРА С.К. Дмитриев, Д.Е. Золотых, И.И. Лебедев	117
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИЗУЧЕНИЕ КОМПОНЕНТ ТЕНЗОРНОЙ АНАЛИЗИРУЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ РЕАКЦИИ $\gamma d \rightarrow pp\pi^-$ В ОБЛАСТИ МАЛЫХ ПЕРЕДАННЫХ ИМПУЛЬСОВ С.К. Дмитриев, С.В. Мельченко, В.В. Гаузштейн	120
МИКРОСТРУКТУРА И СВОЙСТВА СТАЛЬНЫХ ПОЛУФАБРИКАТОВ 308LSI, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ОСАЖДЕНИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ПРОВОЛОКИ Г.Д. Дронок, А.Ю. Степанов	123
ВОЗДЕЙСТВИЕ ПЛАЗМЕННОЙ ХИМИКО-ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА СТРУКТУРУ И ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В СПЛАВЕ 40XНЮ Г.У. Ерболатова, Е.Л. Никоненко, Н.А. Попова	126
ОСОБЕННОСТИ ПРОЯВЛЕНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СВОЙСТВ В [001]-МОНОКРИСТАЛЛАХ SONIAL, СОСТАРЕННЫХ В МАРТЕНСИТЕ А.С. Ефтифеева, Э.И. Янушоните	169
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ И НАКОПЛЕНИЕ ВОДОРОДА В ЦИРКОНИЕВОМ СПЛАВЕ, ПОДВЕРГНУТОМ ПЛАЗМЕННО-ИММЕРСИОННОЙ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ ТИТАНА С.А. Захарченко	132
ПОЛУЧЕНИЕ СИСТЕМЫ ИЗ МНОЖЕСТВА ОТДЕЛЬНОСТОЯЩИХ МИКРОКАМЕР ДЛЯ ДОСТАВКИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВ Ю.А. Зыкова, В.Л. Кудрявцева	135
РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМА И ИССЛЕДОВАНИЕ ИНТЕНСИВНОСТЕЙ В ПОЛОСЕ ν_2 МОЛЕКУЛЫ $^{34}\text{SO}_2$ А.Г. Зятыкова	138
ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНЫХ СВОЙСТВ ПЛЕНОК НА ОСНОВЕ ПОЛИМОЛОЧНОЙ КИСЛОТЫ Н.М. Иванова, Е.О. Филиппова	141
ВЛИЯНИЕ НАПРЯЖЕНИЯ И ДЛИТЕЛЬНОСТИ МИКРОДУГОВОГО ОКСИДИРОВАНИЯ НА ФИЗИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СТРОНЦИЙ- И КРЕМНИЙ-СОДЕРЖАЩИХ БИОПОКРЫТИЙ Я.О. Иващенко, Е.Г. Комарова, Е.А. Казанцева	144
ИССЛЕДОВАНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА МОЛЕКУЛЫ $^{34}\text{SO}_2$ ДИАПОЗОНЕ 440-620 CM^{-1} И. Инь, А.Г. Зятыкова	147
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЗНАЧЕНИЙ ИНДЕКСОВ ХАУНСФИЛДА ОБЪЕКТОВ, ИЗГОТОВЛЕННЫХ МЕТОДОМ ПОСЛОЙНОГО НАПЛАВЛЕНИЯ С РАЗНЫМИ ПАРАМЕТРАМИ ПЕЧАТИ А.А. Исмаилова, М.С. Шкуруний, Ю.М. Черепенников	150
ВЛИЯНИЕ ИМПУЛЬСНОГО НАПРЯЖЕНИЯ НА СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В МИКРОДУГОВЫХ ЛАНТАН-КРЕМНИЙ-СОДЕРЖАЩИХ БИОПОКРЫТИЯХ Е.А. Казанцева, Е.Г. Комарова	153
СРАВНИТЕЛЬНОЕ ИЗУЧЕНИЕ СТОЙКОСТИ ЗАЩИТНЫХ НАНОКОМПОЗИТНЫХ ПОКРЫТИЙ Al-Si-N И In-Sn-O К УДАРНЫМ ВОЗДЕЙСТВИЯМ ТВЕРДЫХ МИКРОЧАСТИЦ Р.А. Калиева	156
РЕГИСТРАЦИЯ РЕАКЦИИ НЕКОГЕРЕНТНОГО ФОТОРОЖДЕНИЯ НЕЙТАЛЬНЫХ ПИОНОВ НА ДЕЙТРОНАХ Е.С. Карпенко, М.Я. Кузин, В.В. Гаузштейн	159
ИССЛЕДОВАНИЕ ВОДОРОДОСТОЙКОСТИ, МЕХАНИЧЕСКИХ И ТРИБОЛОГИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ЦИРКОНИЕВОГО СПЛАВА Э110 С ПОКРЫТИЕМ НИТРИДА ТИТАНА, ОСАЖДЕННОГО МЕТОДОМ МАГНЕТРОННОГО РАСПЫЛЕНИЯ Э.М. Керимкулов	162
СТАБИЛЬНОСТЬ ХАРАКТЕРИСТИК СЕНСОРОВ ВОДОРОДА НА ОСНОВЕ ТОНКИХ ПЛЕНОК Pt/PD/SNO ₂ :SB,Y С.В. Ким	165

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ И ТЕРМОКИНЕТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ЛЕСНОЙ ПОДСТИЛКИ В ПОЖАРООПАСНЫХ РАЙОНАХ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ С.С. Кралинова, Н.Е. Шлегель	168
INFLUENCE OF PROTON IRRADIATION ON STRUCTURE AND MECHANICAL PROPERTIES OF NANOSCALE MULTILAYER METALLIC ZR/NB COATING D.G. Krotkevich	171
СТЕРЕОТАКСИЧЕСКАЯ ЛУЧЕВАЯ ТЕРАПИЯ ПРИ ЛЕЧЕНИИ МЕТАСТАЗОВ ГОЛОВНОГО МОЗГА С.И. Крылов, Е.С. Сухих	174
АНАЛИЗ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ ПОЛОСЫ ν_9 МОЛЕКУЛЫ $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ А.В. Кузнецов	177
СТРУКТУРА И СВОЙСТВА КЕРАМИЧЕСКИХ КОМПОЗИТОВ ZrO_2 , МОДИФИЦИРОВАННЫХ РАЗЛИЧНЫМИ АРМИРУЮЩИМИ НАПОЛНИТЕЛЯМИ А.А. Леонов, В.А. Цуканов, В.Д. Пайгин	180
КИЛЬВАТЕРНОЕ УСКОРЕНИЕ В МНОГОСЛОЙНОМ ВОЛНОВОДЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КОЛЬЦЕВОГО ПУЧКА Н.А. Лесив, К.Р. Мухамедгалиев	183
ЭВОЛЮЦИЯ ДЕФЕКТНОЙ СТРУКТУРЫ ЦИРКОНИЕВОГО СПЛАВА ZR-1NB ПОСЛЕ ХОЛОДНОЙ ПРОКАТКИ А.Д. Ломыгин, К.Д. Уразова	186
ПОЛУЧЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ЭФФЕКТИВНОГО ДИПОЛЬНОГО МОМЕНТА В АНАЛИТИЧЕСКОМ ВИДЕ ДЛЯ МОЛЕКУЛЫ ТИПА SO_2 Люй Цзюньлин, А.Г. Зятькова	189
ВЛИЯНИЕ ВОДОРОДА НА РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ В ЦИРКОНИЕВОМ СПЛАВЕ Лю Уян, Сюй Шупэн	192
ВЛИЯНИЕ ЛЕГИРОВАНИЯ ВОДОРОДОМ НА СТРУКТУРУ И МИКРОТВЕРДОСТЬ ВЫСОКОАЗОТИСТОЙ СТАЛИ, ДЕФОРМИРОВАННОЙ МЕТОДОМ КРУЧЕНИЯ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ Г.Г. Майер, Е.В. Мельников, В.А. Москвина	195
ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ МИКРОСТРУКТУРЫ ТИТАНАНОВЫХ ИЗДЕЛИЙ, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДАМИ АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ С.А. Мартынов, А.Н. Русяев	198
СЦИНТИЛЛЯЦИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЛЮМИНОФОРОВ НА ОСНОВЕ ФТОРИДОВ МЕТАЛЛОВ Л. С. Матецкая, Л.А. Лисицына	201
РАСЧЕТ ТЕМПЕРАТУРЫ В ТВЭЛЕ ИЗ КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА КМ О. Мендоса	204
АНАЛИЗ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ ПОЛОСЫ ν_{10} МОЛЕКУЛЫ C_2D_4 В ДИАПАЗОНЕ $450\text{-}750\text{ cm}^{-1}$ М.А. Меркулова	207
ТРЕХМЕРНАЯ ДОЗИМЕТРИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА СОЧЕТАННОГО КУРСА ЛУЧЕВОЙ ТЕРАПИИ РАКА ШЕЙКИ МАТКИ Г.С. Модебадзе, Е.С. Сухих	211
ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ УСТРОЙСТВ РЕАКТОРА ИРТ-Т ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЙ БОР-НЕЙТРОНЗАХВАТНОЙ ТЕРАПИИ П.А. Молодов, М.Н. Аникин, А.Г. Наймушин	214
ЯДЕРНО-ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ АНАЛИЗА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИХ ИСТОЧНИКОВ ИЗЛУЧЕНИЯ И.В. Морева	217
ФАЗОВЫЙ СОСТАВ И ОСОБЕННОСТИ РАЗРУШЕНИЯ ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ АУСТЕНИТНОЙ НЕРЖАВЕЮЩЕЙ СТАЛИ, ПОДВЕРГНУТОЙ ИОННОМУ АЗОТИРОВАНИЮ В.А. Москвина, Г.Г. Майер, Е.В. Мельников	220

СОРБЦИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ И АТОМАРНЫХ ГАЗОВ УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ Д.А. Мустахиева	223
МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОТРУБОК В ВОДОРОДНОЙ АТМОСФЕРЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ А.В. Николаева	226
СТРУКТУРНО - МАСШТАБНЫЕ УРОВНИ ДЕФОРМАЦИИ ДВУХФАЗНОГО ТИТАНОВОГО СПЛАВА Е.Н. Николенко, Т.С. Куницына	269
ВЛИЯНИЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА СТРУКТУРУ НИКЕЛЕВОГО СПЛАВА А.В. Никоненко, Н.А. Попова, Е.Л. Никоненко	232
ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРНО-ФАЗОВОГО СОСТОЯНИЯ МНОГОСЛОЙНЫХ ПОКРЫТИЙ НА ОСНОВЕ Zr-Y-O А.В. Никоненко	235
КОНЦЕНТРАЦИЯ ЛЁГКИХ ИОНОВ И ПОЛЯРНЫЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ПРОВОДИМОСТИ ВОЗДУХА В РАЗЛИЧНЫХ МЕТЕОРОЛОГИЧЕСКИХ УСЛОВИЯХ М.В. Оглезнева	238
ОСОБЕННОСТИ РАЗВИТИЯ ТЕРМОУПРУГИХ МАРТЕНСИТНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ ПОД НАГРУЗКОЙ В [110]-МОНОКРИСТАЛЛАХ СПЛАВА Ni ₅₁ Fe ₁₈ Ga ₂₇ Co ₄ К.С. Осипович	241
ПРИМЕНЕНИЕ ИК-ТЕРМОГРАФИИ В ИССЛЕДОВАНИИ ПЕРЕНОСА ГОРЯЩИХ И ТЛЕЮЩИХ ЧАСТИЦ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ В РЕЗУЛЬТАТЕ ПРИРОДНЫХ ПОЖАРОВ В.В. Перминов, Д.П. Касымов, М.В. Агафонцев	244
О СВЕРХЗВУКОВОМ ТЕЧЕНИИ ГАЗА В ПЛОСКОМ КАНАЛЕ С ОСЦИЛЛИРУЮЩЕЙ ВЕРХНЕЙ СТЕНКОЙ Е.В. Перчаткина	247
ДЕГРАДАЦИЯ МЕТИЛЕНОВОГО ЗЕЛЕНОВОГО В ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКОМ РЕАКТОРЕ А.Ю. Петрова, В.Р. Аргюшин	250
АНТИФЕРРОМАГНИТНЫЕ ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ИЗОЛЯТОРЫ MnBi ₂ Te ₂ Se ₂ И VBi ₂ Te ₂ Se ₂ Е.К. Петров	253
ПОЛУЧЕНИЕ ОКСИДНЫХ ПЛЕНОК ТАНТАЛА МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОЛИТИЧЕСКОГО АНОДИРОВАНИЯ И ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ ОПТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ Ю.В. Пилипенко, Н.А. Мухамбедярова	256
СВЕРХЭЛАСТИЧНОСТЬ В СОСТАРЕННЫХ МОНОКРИСТАЛЛАХ СПЛАВА FeMnAlNi В.В. Поклонов	259
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА В ТКАНЕЭКВИВАЛЕНТНЫХ МАТЕРИАЛАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИНСТРУМЕНТАРИЯ GEANT4 А.Э. Прокопьев, И.А. Милойчикова, А.А. Красных	262
ИССЛЕДОВАНИЕ ДЕФОРМАЦИОННОГО ПОВЕДЕНИЯ СЕГМЕНТА ШЕЙНОГО ОТДЕЛА ПОЗВОНОЧНИКА ПРИ ДЕФОРМАЦИИ МЕЖПОЗВОНОЧНОГО ДИСКА Ю. А. Рикун	265
МЕХАНИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СИЛУМИНА ЗАЭВТЕКТИЧЕСКОГО СОСТАВА, ПОДВЕРГНУТОГО ИОННО-ЭЛЕКТРОННО-ПЛАЗМЕННОЙ МОДИФИКАЦИИ М.Е. Рыгина, А.Д. Тересов, В.В. Шугуров	268
РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ ВОДОРОДА В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ МЕТОДОМ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ И.С. Саквин	271
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНО-МОРФОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК НАНОЧАСТИЦ ДИОКСИДА КРЕМНИЯ, ПОЛУЧЕННОГО ПЛАЗМЕННО-ДУГОВЫМ МЕТОДОМ М.А. Семеновых, П.В. Космачев	274

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РАСЧЕТНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ СОПРОВОЖДЕНИЯ РАБОТЫ ИРТ-Т А.А. Сливин	277
МОДЕЛИРОВАНИЕ КАНАЛИРОВАНИЯ ИОНОВ НИЗКИХ ЭНЕРГИЙ В УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ А.В. Степанов	280
СОЗДАНИЕ МОДЕЛИ ЭЛЕКТРОННЫХ И ФОТОННЫХ ПУЧКОВ ЛИНЕЙНОГО УСКОРИТЕЛЯ ELEKTA SYNERGY В СИСТЕМЕ ПЛАНИРОВАНИЯ PLUNC Я.Н. Сутыгина, Е.С. Сухих	283
АНАЛИЗ УПРУГО-НАПРЯЖЕННОГО СОСТОЯНИЯ ГРАНИЦ НАНОКРИСТАЛЛОВ В РАМКАХ ДИСКЛИНАЦИОННОГО ПОДХОДА И.И. Суханов	286
ПОЛЯ НАПРЯЖЕНИЙ И ЭНЕРГИИ ДЕФЕКТОВ ДИСКЛИНАЦИОННОГО ТИПА В ЗОНАХ ЛОКАЛИЗАЦИИ УПРУГИХ ДИСТОРСИЙ И.И. Суханов	289
УСТАНОВКА ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТОВ ДИФФУЗИИ ВОДОРОДА МЕТОДОМ ВИХРЕВЫХ ТОКОВ В МЕТАЛЛАХ ПРИ ИХ НАВОДОРОЖИВАНИИ Сюй Шупэн, Чжоу Хао	292
ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ ВОДОРОДА НА УДЕЛЬНОЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ СОПРОТИВЛЕНИЕ ЦИРКОНИЯ: РАСЧЕТЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ Тан Цичэн	295
МОДЕЛИРОВАНИЕ РАССЕЯНИЯ СВЕТА НА АТМОСФЕРНЫХ ЛЕДЯНЫХ КРИСТАЛЛАХ СЛОЖНОЙ ФОРМЫ Д.Н. Тимофеев, А.В. Коношонкин	298
ПРОЧНОСТНЫЕ СВОЙСТВА КЕРАМИЧЕСКОГО КОМПОЗИТА $ZrO_2 - MgO$ ПРИ ТРЕХТОЧЕЧНОМ ИЗГИБЕ Д.А.Ткачев, А.С. Буяков	301
ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ПРОЦЕССА МИКРОДУГОВОГО ОКСИДИРОВАНИЯ И СОСТАВА ЭЛЕКТРОЛИТА НА ФОРМИРОВАНИЕ И СВОЙСТВА СЕРЕБРСОДЕРЖАЩИХ БИОПОКРЫТИЙ А.В. Угодчикова	304
ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОНИЦАЕМОСТИ УГЛЕРОДНОГО НАНОПОЛОТНА А.В. Уколов, М.А. Бубенчиков	307
АДСОРБЦИЯ ФТОРА И КОАДСОРБЦИЯ ФТОРА И КИСЛОРОДА НА In -ОБОГАЩЕННОЙ ПОВЕРХНОСТИ $InSb(111)$ А.А. Фукс, А.В. Бакулин	310
ВЛИЯНИЕ КРИВИЗНЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ В ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЯХ ОБРАЗЦОВ ТИТАНОВОГО СПЛАВА VT_6 НА МЕХАНИЗМЫ УСТАЛОСТНОГО РАЗРУШЕНИЯ Р.Р. Хайруллин, Ю.С. Бордулев, И.В. Власов	313
ПРОГНОЗИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НАНОЧАСТИЦ В РАСПЛАВЕ МЕТАЛЛА М.Г. Хмелева, Л.Л. Миньков	316
СТРУКТУРНО-ФАЗОВОЕ СОСТОЯНИЕ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОГО ТИТАНОВОГО СПЛАВА VT_{16} А.О. Хованова	319
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ БЕЗГАЗОВОГО ГОРЕНИЯ СИСТЕМЫ СОПРЯЖЕННЫХ СЛОЕВ НА ОСНОВЕ СОСТАВОВ $Ti+Al$ И $Ni+Al$ Т. И. Худякова	322
ВЛИЯНИЕ ДЕФЕКТНОЙ СТРУКТУРЫ И РЕЖИМОВ ХИМИКО-ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА КОНЦЕНТРАЦИЮ КИСЛОРОДА В СПЛАВЕ СИСТЕМЫ $V-Cr-Zr-Ta$ А.С. Цверова, И.В. Смирнов, К.В. Гриняев	325
ПРИМЕНЕНИЕ ПОЗИТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРЫ ПРИРОДНЫХ ПОЛИМЕРОВ НА ПРИМЕРЕ СОСНЫ СИБИРСКОЙ КЕДРОВОЙ Цуй Цзян, Р.С. Лаптев, Ю.С. Бордулев	328

ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОКОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ZrO_2 , АРМИРОВАННЫХ ОДНОСТЕННЫМИ УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ В.А. Цуканов, А.А. Леонов	331
ПРОНИКНОВЕНИЯ ВОДОРОДА В ТИТАН ИЗ СРЕД РАЗНОГО АГРЕГАТНОГО СОСТОЯНИЯ Чжан Тяньюань, Ерхат Дуалетханов	334
ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА КОЭФФИЦИЕНТОВ ЛИНЕЙОГО ПРЕДСКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБРАБОТКИ ЭХО-СИГНАЛОВ УЛЬТРАЗВУКОВОГО НЕРАЗРУШАЮЩЕГО КОНТРОЛЯ Чжан Юймин	337
ИЗУЧЕНИЕ И МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ПРОЦЕССОВ ДИФФУЗИИ ВОДОРОДА В ТИТАНЕ Чжан Хунжу	340
АНАЛИЗ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ В ПОЛОСЕ ν_2 ДИОКСИДА СЕРЫ Чжоу Синьтун	343
НАКОПЛЕНИЕ ВОДОРОДА В ТИТАНЕ ПРИ ЕГО ОБЛУЧЕНИИ НЕЙТРОНАМИ Чжоу Хао, Сюй Шупэн	346
ИССЛЕДОВАНИЕ НЕОДНОРОДНО НАВОДОРОЖЕННОГО ТИТАНА VT1-0 МЕТОДОМ ИЗМЕРЕНИЯ ТЕРМОЭДС Чжу Ибо, Сюй Шупэн	369
СПЕКТР ВИРТУАЛЬНЫХ ФОТОНОВ В РЕАКЦИИ ЭЛЕКТРОРОЖДЕНИЯ ПИОНОВ НА ДЕЙТРОНЕ К.А. Шарко, В.В. Гаушштейн, А.Ю. Логинов	352
РОЛЬ МЕТОДА ЭЛЕКТРОФОРЕТИЧЕСКОГО ОСАЖДЕНИЯ В СОЗДАНИИ БИОКОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ СЛОЕВ ГИДРОКСИАПАТИТИ И НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА А.А. Шаронова	355
СТЕРЕОТАКСИЧЕСКАЯ РАДИОТЕРАПИЯ ПРЕДСТАТЕЛЬНОЙ ЖЕЛЕЗЫ В РЕЖИМЕ ГИПОФРАКЦИОНИРОВАНИЯ (SBRT\VMAT) В ТООД Е.В. Шеффрес	358
АДДИТИВНАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ПОЛУЧЕНИЯ ИЗДЕЛИЙ ИЗ КЕРАМИКИ Н. А. Шульц, Н. В. Гирунт	361
ДИФФУЗИОННЫЕ БАРЬЕРЫ ДЛЯ ВОДОРОДА В АЛЬФА-ФАЗЕ ТИТАНА. РАСЧЕТЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ Ши Юй	364
УДАЛЕНИЕ ВОДОРОДА ИЗ Ti VT 1-0 ПОД ДЕЙСТВИЕМ УСКОРЕННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ Ян Хан, Лю Юйчжен, М.Н. Бабихина	367

**DFT STUDY OF HYDROGEN ADSORPTION ON PURE AND FUNCTIONALIZED CARBON
NANOTUBES**E.V. Anikina

Scientific Supervisor: Associate Professor, Dr. Sc. (Physics and Mathematics) V.P. Beskachko

South Ural State University, Russia, Chelyabinsk, Lenin prospekt, 76, 454080

E-mail: anikate@inbox.ru**АДСОРБЦИЯ ВОДОРОДА НА ЧИСТЫХ И ДОПИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫХ
НАНОТРУБКАХ: DFT МОДЕЛИРОВАНИЕ.**Е.В. Аникина

Научный руководитель: доцент, д.ф.-м.н. В.П. Бескачко

Южно-Уральский государственный университет (НИУ),

Россия, г. Челябинск, пр. Ленина, 76, 454080

E-mail: anikate@inbox.ru

***Аннотация.** Рассматривается адсорбция нескольких молекул водорода на внешней и внутренней поверхности комплекса «углеродная нанотрубка (9,9)@Li». Численные эксперименты проводились в пакете SIESTA в двух приближениях для обменно-корреляционного потенциала: приближении обобщенных градиентов (GGA) и приближении локальной электронной плотности (LDA). Моделирование показало, что добавление атома лития позволяет увеличить энергию адсорбции 3-4 молекул водорода (расположенных в первой координационной сфере Li) по сравнению со случаем сорбции на чистой поверхности углеродной нанотрубки. При этом энергии связи попадают в диапазон 200-700 мэВ/(молекулу H₂), обеспечивающий эффективность циклов сорбции/десорбции газа, только в случае внутренней сорбции.*

Introduction. Hydrogen is one of the most promising energy carriers as it has high energy content per mass, it can be generated from clean and green sources, and its combustion produces only water as a byproduct [1]. However, to develop hydrogen economy the difficulties concerning the construction of a feasible onboard hydrogen storage system should be overcome.

Carbon nanotubes (CNTs) are considered as perspective fuel-storage medium due to their high thermal and chemical stability, the simplicity, and low cost of production [2]. However, in spite their low density and high surface area, in a pure form they cannot adsorb sufficient amount of hydrogen due to the weak bond between H₂ molecules and substrate [3]. The possible solution to this problem is more active adsorption sites formation, for instance, by heteroatom doping or metal decoration.

Metal doping improves hydrogen storage capacities in the most effective way if heteroatoms are atomically dispersed. When metal atoms form a cluster, it decreases possible H₂ uptake [4]. Therefore, the perspective element for such use is lithium, because it has high nucleation barrier [5]. Recently, Li-doped CNTs have been investigated theoretically and experimentally in search of effective material for Li-ion battery [6, 7]. Much less is known about the interaction of these structures with hydrogen, especially in case of internal sorption. To fill this knowledge gap we performed ab initio modeling of H₂ physisorption on CNT(9,9)@Li.

Model and simulation details. We considered external and internal sorption of hydrogen on the armchair CNT(9,9) with metallic conductivity. Its diameter (12.2 Å) is big enough for placing lithium and molecular hydrogen into the nanotube without any steric or diffusion hindrances [6]. The simulated fragment of nanotube has 4 CNT primitive unit cells (the length equals to approximately 10 Å) because at this length the spurious interaction of Li atom and H₂ molecules with its images can be neglected.

For density functional calculations we utilized the SIESTA package [8], where periodic boundary conditions are implemented. The local density approximation LDA (Ceperley-Alder functional) and the generalized gradient approximation GGA (Perdew-Burke-Ernzerhof functional) were used. Geometry optimization was performed using the conjugate-gradient method.

With the optimized double-zeta polarized basis set for all elements (H, C, Li) [9], Meshcutoff [8] of 360 Ry for the GGA calculations and 210 Ry for the LDA calculations, and the [1,1,32] Monkhorst-Pack set of *k*-points calculated adsorption energies have a numerical precision of approximately 7 meV.

Results. At the first stage, we performed geometry optimization of several initial configurations of complexes CNT(9,9)@Li@(H₂)_{*n*}, where *n* = 6. Structures with the lowest total energy were chosen as starting configuration for the modeling of hydrogen desorption (see Fig. 1).

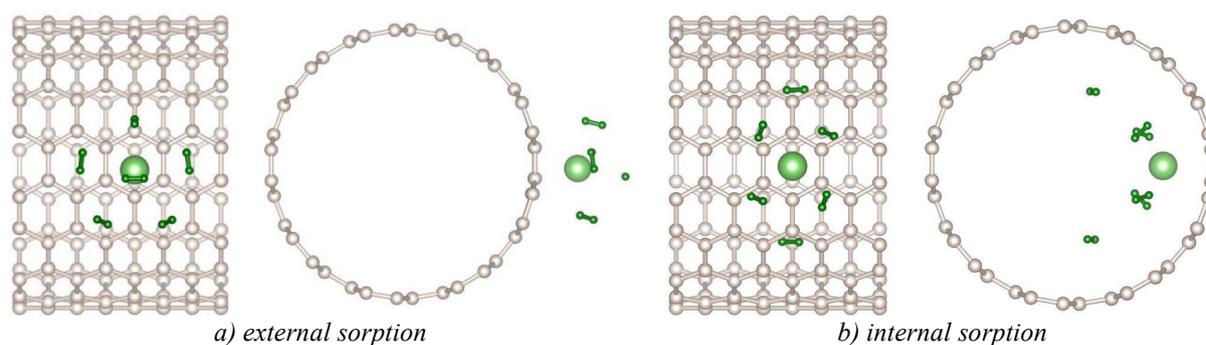


Fig.1. Starting configuration of hydrogen molecules on the complexes CNT(9,9)@Li

Hydrogen molecules were removed one by one. We considered all symmetrically nonequivalent positions of H₂ molecules at each step, though for the next step we chose the structure with the lowest total energy as the initial configuration. Adsorption energies were calculated using formula $E_{\text{ads}} = E_k - E_{k-1} - E_{\text{H}_2}$, where E_k is the total energy of the complex CNT(9,9)@Li@(H₂)_{*k*}, E_{k-1} - the same for the index *k* - 1, E_{H_2} - the total energy of a hydrogen molecule. Table 1 shows the resulting adsorption energies.

Table 1

Adsorption energy E_{ads} (meV) of hydrogen molecule on the complexes CNT(9,9)@Li

Number of H ₂ molecule, <i>n</i>	External sorption			Internal sorption		
	CNT(9,9)@Li		pure CNT(9,9) one H ₂ molecule	CNT(9,9)@Li		pure CNT(9,9) one H ₂ molecule
	GGA	LDA		GGA	LDA	
6	56	215	[10]: 61 (GGA) 159 (LDA)	122	273	[10]: GGA: 122 LDA: 253
5	75	216		122	271	
4	112	271		146	346	
3	136	265		173	352	
2	141	257		189	350	
1	152	264		200	345	

There is a tendency of the LDA to overestimate the energy of van der Waals interaction. In contrast, calculations with the GGA usually result in underrated energies of this weak interaction. So, the true value of E_{ads} is in the range of values obtained using these two approximations [11].

Conclusions. Doping with Li atom increases the adsorption energy of up to four hydrogen molecules, which are located in the first coordination environment of adatom. Adsorption energies rise up to 100 meV in comparison with the sorption on pure CNT(9,9), though the values in case of external sorption are too low for room temperature applications. So, the optimal range of binding energy 200-700 meV per H₂ molecule can be achieved only in case of adsorption of 3-4 hydrogen molecules near Li adatom inside the tube (9,9).

REFERENCES

1. Dutta, S. A review on production, storage of hydrogen and its utilization as an energy resource. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 2014. Vol. 20, no. 4. pp. 1148-1156.
2. Sakintuna, B., Yürüm, Y. Templated porous carbons: a review article. *Industrial & engineering chemistry research*, 2005. Vol. 44, no. 9. pp. 2893-2902.
3. Xia, Y., Yang, Zh., Zhu, Y. Porous carbon-based materials for hydrogen storage: advancement and challenges. *Journal of Materials Chemistry A*, 2013, Vol. 1, no. 33, pp. 9365-9381.
4. Krasnov, P.O., *et al.* Clustering of Sc on SWNT and reduction of hydrogen uptake: ab-initio all-electron calculations. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2007, Vol. 111, no. 49, pp. 17977-17980.
5. Liu, M., *et al.* First-principles studies of Li nucleation on graphene. *The journal of physical chemistry letters*, 2014. Vol. 5, no. 7. pp. 1225-1229.
6. Sozykin, S.A., Beskachko, V.P. Structure of endohedral complexes of carbon nanotubes encapsulated with lithium and sodium. *Molecular Physics*, 2013. Vol. 111, no. 7. pp. 930-938.
7. Sozykin, S.A., Beskachko, V.P. Endohedral complexes of carbon nanotubes with lithium at finite temperature. *Bulletin of the South Ural State University. Series "Mathematics. Mechanics. Physics"*, 2014. Vol. 6, no. 2. pp. 63-67.
8. Soler, J.M., *et al.* The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2002. Vol. 14, no. 11, pp. 2745.
9. Anikina, E.V., Beskachko, V.P. Optimal basis-set for modeling of hydrogen adsorption on carbon nanotubes via SIESTA package. *Proceedings of 9th conference of doctorate students, South Ural State University*, 2017, pp. 126-134 (in Russian).
10. Anikina, E.V., Beskachko, V.P. Ab initio studies of hydrogen physisorption on clear and Li-doped carbon nanotubes. *Bulletin of SUSU. Series: "Mathematics. Mechanics. Physics"*. 2017. Vol. 9, no. 2, pp. 64-71.
11. Klimeš, J., Michaelides, A. Perspective: Advances and challenges in treating van der Waals dispersion forces in density functional theory. *The Journal of chemical physics*, 2012, Vol. 137, no. 12, pp. 120901

SHAPE MEMORY EFFECT PARAMETERS IN TINI-BASED ALLOYS WITH SILVER

G.A. Baigonakova, E.S. Marchenko, D.V. Barashkova

Scientific Supervisor: Prof., Dr. V.E. Gunther

Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050

E-mail: gat27@mail.ru

ПАРАМЕТРЫ ЭФФЕКТА ПАМЯТИ ФОРМЫ В СПЛАВАХ НА ОСНОВЕ TINI С СЕРЕБРОМ

Г.А. Байгонакова, Е.С. Марченко, Д.В. Барашкова

Научный руководитель: профессор, д.т.н. В.Э. Гюнтер

Томский государственный университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050

E-mail: gat27@mail.ru

***Аннотация.** Статья представляет исследования влияния добавки серебра с разной концентрацией до 1,5 ат.% на сплавы на основе TiNi. Построены температурные зависимости накопления и возврата деформации при многократном эффекте памяти формы (ЭПФ) сплавов (TiNiMoFe)Ag и определены параметры ЭПФ (температуры начала и конца накопления и возврата деформации, остаточная и обратимая деформации, ширина петли гистерезиса). Показано, что увеличение концентрации серебра приводит к росту ширины петли гистерезиса и величины обратимой деформации. Изменение состава в B2 структуре приводит к смещению характеристических температур превращения исследуемых сплавов.*

Introduction. It is known that the TiNi-based alloys are a promising and attractive material for biomedical applications among shape memory alloys. Many characteristics of alloys can be improved by adding alloying elements. The biocompatible TiNiMoFe alloy (TN-10 brand) has been chosen as a basis due to its unique hysteresis properties presents a high scientific interest [1]. From the biomedicine point of view, silver is a promising alloying element, since it is known for its antibacterial properties, which is related to the release Ag⁺ ions from pure silver phases [2]. In addition, TiNiAg alloys show good biocompatibility and corrosion resistance comparable to binary TiNi alloys. In [3] the effect of silver adding on hysteresis and physico-mechanical properties is considered. Although the biocompatible TN-10 alloy provides excellent properties, the antibacterial effect would significantly expand the range of its biomedical applications. Therefore, the purpose of this work is to study the effect of an addition of different silver concentrations on the parameters of the multiple shape memory effect in TiNiMoFe alloys.

Materials and Methods. TiNiMoFeAg alloys were prepared in an induction furnace in an atmosphere of inert argon gas by remelting sponge Ti and Ni plates with the addition of the Mo, Fe and Ag alloying elements. The alloying scheme: Ti₅₀Ni_{49.5-X}Mo_{0.3}Fe_{0.2}Ag_X (X = 0, 0.1, 0.2, 0.5, 1 at.%). Specimens (50 × 1 × 1 mm in size) were spark cut by electric-discharge wire-cut from the produced ingots. The shape memory parameters were studied in conditions of tension under a constant load of 2 kg.

Results. Fig. 1 shows the temperature dependences of strain accumulation and recovery at multiple SME $\varepsilon(T)$ of (TiNiMoFe)Ag with different Ag concentration under a constant load. In all the investigated alloys the martensitic transformation (MT) with a sequence B2→R→B19' is realized, where the MT products are the

rhombohedral R- and monoclinic B19'-phases [4, 5]. The complete transformation cycle is characterized by the temperatures M'_S , M'_f , A'_S , A'_f . At $T < M'_f$ the martensite is stable, and the stable phase at $T > A'_f$ is austenite. For the temperature values $M'_S < T < A'_S$ both phases are stable.

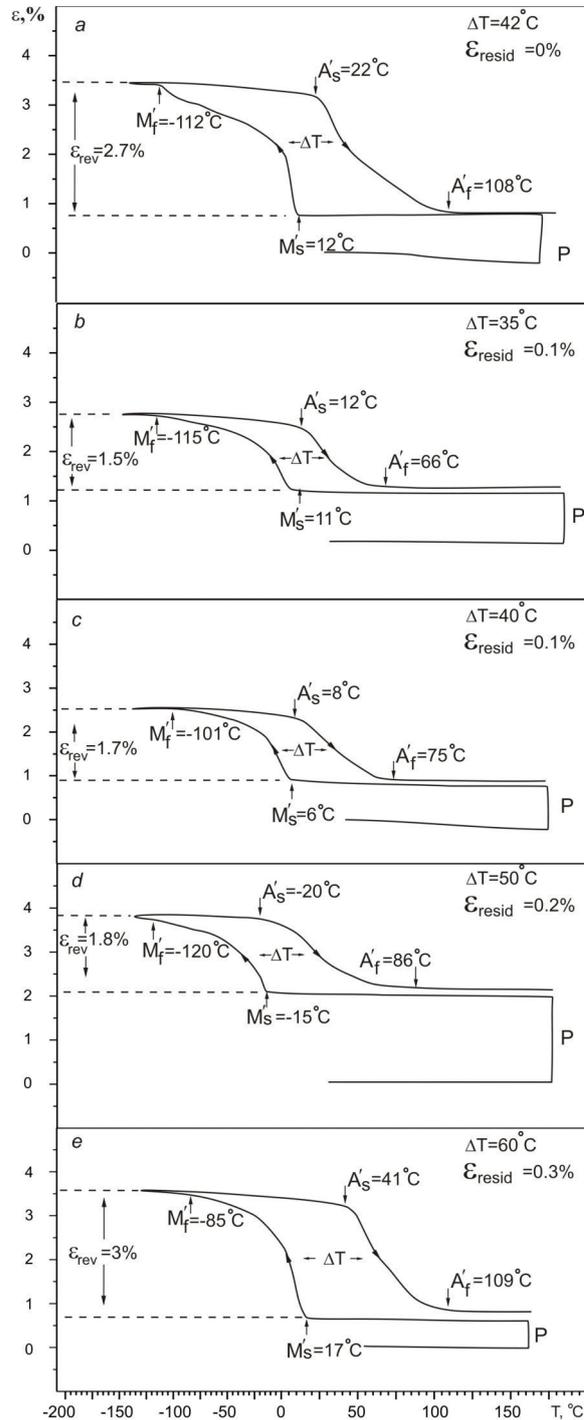


Fig. 1. Temperature dependences of strain accumulation and recovery at multiple SME $\epsilon(T)$ of (TiNiMoFe)Ag in the initial state without Ag (a) and with Ag concentration: (b) – 0.1 at.%, (c) – 0.2 at.%, (d) – 0.2 at.%, (d) – 0.5 at.%, (e) – 1 at.%, where ϵ_{rev} and ϵ_{resid} are the reversible and residual strains, ΔT is the hysteresis loop width; M'_S and M'_f – start and finish temperatures of strain accumulation, A'_S and A'_f – start and finish temperatures of strain recovery

The experimental results show that doping with silver to 0.5 at.% leads to a decrease in the MT temperatures compared to the initial alloy, while the addition of 1 at. % Ag increases the temperatures. The change in the composition of TiNi in the homogeneity region connected with deposition of secondary phase's particles affects the MT temperatures displacement. With an increase in the Ag content from 0.1 to 1 at. % the reversible strain increases in the alloys and reaches $\approx 3\%$. The alloys have the residual strain ϵ_{resid} , but in the alloys with 1 at.% Ag it is maximal. ϵ_{resid} is the result of plastic strain, which leads to a decrease in the mobility

of the interphase boundary. The plastic component of strain also causes a wider hysteresis width. The width of the hysteresis loop ΔT increases with increasing concentration of silver in the alloy. This value corresponds to the amount of energy dissipated at full MT cycle and it is defined by the sum of contribution of "chemical" and "non-chemical" components of a dissipative driving force [1]:

$$\Delta G = G_D^{A \rightarrow M} + G_D^{M \rightarrow A} = (\Delta G_{хим} + \Delta G_{нехим}) = \frac{H}{T_0} \left(\frac{A_s + A_f}{2} - \frac{M_s + M_f}{2} \right) + (V^M + V^A)p \quad (1).$$

where ΔG – the Gibbs dissipative driving force; the first term of the equation is a "chemical" component contribution of the driving force (H – absolute value of the latent heat of MT, T_0 – the temperature of the chemical phase equilibrium); V^M and V^A – the volumes of low-temperature and high-temperature phases; p is the "non-chemical" contribution which occurs due to the energy dissipation in the process of formation and motion of interphase boundaries during the MT (by convention, this contribution is called "friction").

Temperature dependences of strain accumulation and recovery at multiple SME $\varepsilon(T)$ of (TiNiMoFe)Ag show that alloys with 0.1, 0.2 and 0.5 at.% Ag exhibit the more pronounced hysteresis slope as compared with the alloys with 0 and 1 at.% Ag. This is explained by an increase in the nonchemical contribution p to the total dissipative energy of the MT and the decrease in the total material volume ($V^M + V^A$) participating in the martensite transformation according to equation (1).

Shape memory effect parameters as well as other properties of TiNi-based alloys are sensitive to the composition change due to the silver addition. It was shown that a growth in the silver concentration led to an increase in the hysteresis loop width and the reversible strain value. The change in B2 structure composition led to a shift in the characteristic transformation temperatures of the investigated alloys. The alloy with 1 at.% Ag showed the maximum values of transformation temperatures, residual strain ε_{resid} , reversible strain ε_{rev} and hysteresis loop width ΔT .

REFERENCES

1. V.E. Gunther; V.N. Hodorenko; T.L. Chekalkin et al. (2011). Medical materials and shape memory implants. Tomsk: MIC
2. Y.F. Zheng, B.B. Zhang, B.L. Wang, Y.B. Wang, L. Li, Q.B. Yang, L.S. Cui. (2011). Introduction of antibacterial function into biomedical TiNi shape memory alloy by the addition of element Ag. Acta Biomater, no. 7, pp. 2758-2767.
3. Su-Jin Chun, Jung-pil Noh, Jong-taek Yeom, Jae-il Kim, Tae-hyun Nam. (2014). Martensitic transformation behavior of Ti–Ni–Ag alloys. Intermetallics, no. 46, pp. 91-96.
4. Baigonakova G.A., Marchenko E.C., Gyunter V.E. The Effect of Thermal Cycling on the Martensitic Transformations of (TiNiMoFe)Ag Alloys. (2017). Technical Physics Letters, vol. 43, no. 10, pp. 940–943.
5. V. Gunther, E. Marchenko, T. Chekalkin, G. Baigonakova, Ji-soon Kim, Ji-hoon Kang, A. Klopotov. (2017). Study of structural phase transitions in quinary TiNi(MoFeAg)-based alloys. Mater. Res. Express, vol. 4, no 10, p. 105702.

**GENERATION OF THZ RADIATION BY SEQUENCE OF RING BEAMS IN MULTILAYER
DIELECTRIC WAVEGUIDE**

K.R. Mukhamedgaliyev, N.A. Lesiv

Scientific Supervisor: asoc. Prof., PhD. A.M. Altmark

St.-Petersburg State electrotechnical University, Russia, St.-Petersburg, prof. Popov str. 5, 197022

E-mail: kamilwork9@gmail.com

**ГЕНЕРАЦИЯ ТЕРАГЕРЦОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬЮ КОЛЬЦЕВЫХ
СГУСТКОВ В МНОГОСЛОЙНОМ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ВОЛНОВОДЕ**

К.Р. Мухамедгалиев, Н.А. Лесив

Научный руководитель: доцент, к.ф.-м.н. А.М. Альтмарк

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет,

Россия, г. Санкт-Петербург, ул. проф. Попова 5, 197022

E-mail: kamilwork9@gmail.com

***Аннотация.** В данной работе описывается новый тип источника ТГц излучения в многослойном диэлектрическом волноводе, основанного на эффекте Вавилова-Черенкова и создаваемого последовательностью электронных кольцевых сгустков. В программе Mathcad было проведено моделирование данной задачи. Расчет осуществлялся при определенных параметрах сгустков и волновода, при которых осуществляется возбуждение TM_{03} моды для формирования терагерцового излучения на частоте 531.2 ГГц. Кроме того, определена степень монохроматичности сформированного излучения, приведены графики спектра, а также проанализированы полученные результаты.*

Introduction. Recently there have been tendencies related to the development of Terahertz radiation sources, as well as its wide application in various fields of science, such as chemistry, biology, medicine. The main requirements for terahertz radiation are the frequency, amplitude, and the degree of monochromaticity of radiation. The main purpose of the work is to select the parameters of the waveguide and ring-shaped bunches propagating in the dielectric waveguide and generating THz radiation based on TM_{03} mode which has a high degree of monochromaticity. We used ring beams for creating THz radiation because transverse instability of these bunches is less than usual gaussian bunch [1].

Method of investigation. In this work we use macroparticle method [2,3] to simulate the generation of THz radiation. The macroparticle method is based on presentation of bunch with charge Q as number of N particles with charges Q/N . Each particle has a mass which is equal to the mass of the electron. The field created by the bunch is calculated as the sum of the fields of all the macroparticles.

Formulation of the problem. The sequence of circular electron bunches propagates in a multilayer dielectric cylindrical waveguide, which is a dielectric-vacuum-dielectric-metal structure (Fig. 1). The circular bunch excites the Vavilov-Cherenkov radiation in the dielectric waveguide behind itself. With a certain selection of the parameters of the waveguide (a, b, c) and the distance between the bunches, the TM_{0n} -type modes are excited. Empirically selecting the distance between bunches, we can excite a certain mode, corresponding to the frequency of radiation of the terahertz range. The instability arising from the dynamics of ring bunches is due to

the presence of hybrid HEM type modes. In Table 1, we define the parameters of the waveguide and bunches for numerical simulation.

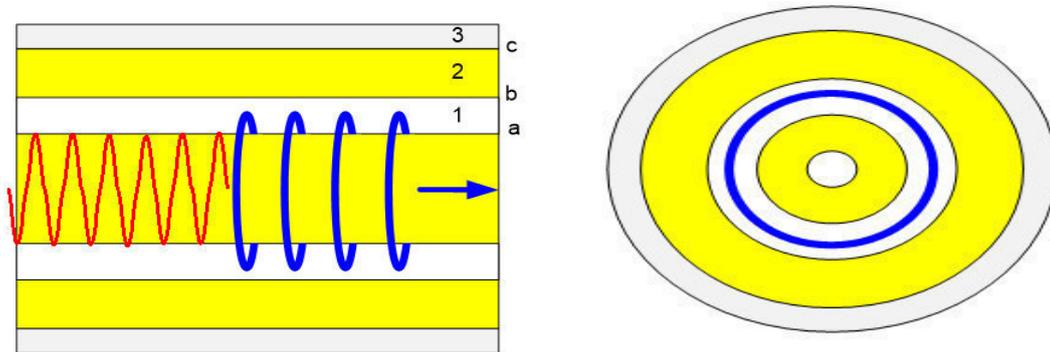


Fig. 1 - Longitudinal (left) and transverse (right) views of a cylindrical waveguide.

(1) - vacuum channel, (2) - dielectric layer,
(3) - metal walls. The blue arrow shows the direction of the clot

Table 1

Waveguide and bunch parameters for numerical simulation

Parameter	Value	Parameter	Value
radius «a» (um)	200	Number of bunches	4
radius «b» (um)	700	beam energy (MeV)	~ 75
radius «c» (um)	900	Distance between bunches (cm)	0.144
Frequency mode TM01 (GHz)	155.4	Dielectric «ε»	3.8
Frequency mode TM02 (GHz)	359.2	Radius of the ring (um)	250
Frequency mode TM03 (GHz)	531.2	Longitudinal beam size (um)	100
Frequency mode TM04 (GHz)	798.3	Charge (nC)	1
Waveguide length (cm)	10		

Results. We have performed the simulation the simulation for the given bunches and waveguide parameters. Figure 2 is a graph of the resulting field E_z , formed after a sequence of four circular bunches propagating from right to left.

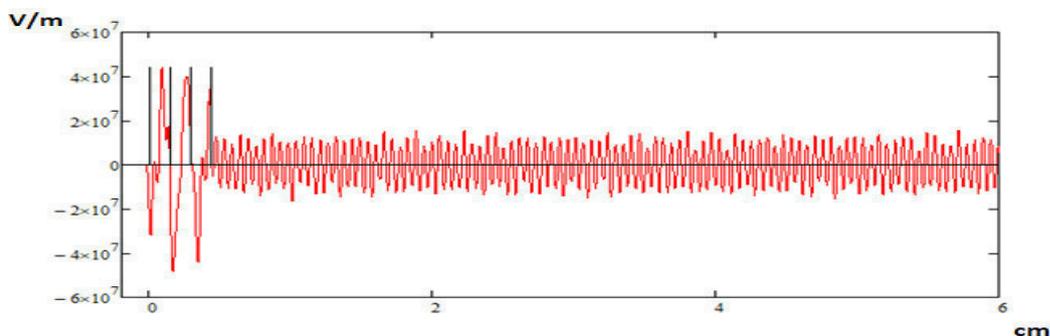


Fig. 2 - Field E_z (THz radiation based on TM03 mode), formed after a sequence of four bunches separated by distance 0.144 cm.

It can be seen from the figure that the wavelength of the radiation wave packet is 6 cm. We have performed the Fourier transform and obtained the resulting spectrum shown in Figure 3

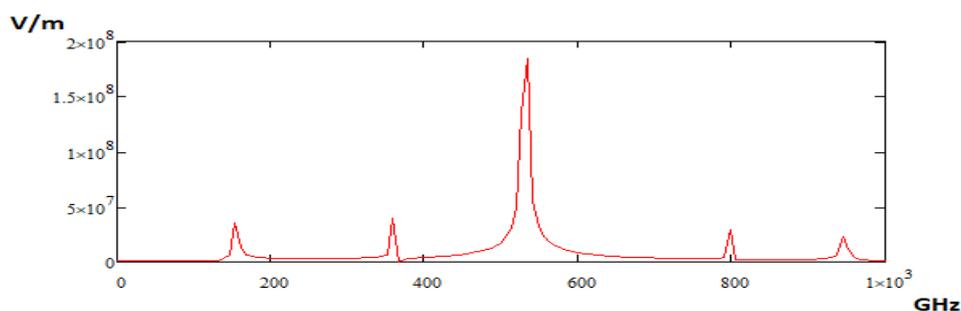


Fig. 3 - Total radiation spectrum

We have determined the degree of the degree of monochromaticity of m as the ratio of the amplitude of the excited mode to the sum of all the amplitudes of the spectrum:

$$m = \frac{TM_{03}}{TM_{01} + TM_{02} + TM_{03} + TM_{04}} = \frac{1.84 * 10^8}{3.58 * 10^7 + 3.93 * 10^7 + 1.84 * 10^8 + 2.86 * 10^7} = 0.64$$

Conclusion. In the present work we have carried out a study of the process of generation of terahertz radiation by a sequence of annular bunches in a multilayer dielectric waveguide. For the resulting radiation, parameters such as frequency and degree of monochromaticity were determined. It was found that this ring generation scheme was more stable, in comparison with the classical scheme using simple Gaussian beams in a dielectric waveguide with a vacuum channel, and therefore it didn't require the presence of a focusing system. Therefore, this type of generation can be an economically more advantageous solution.

Acknowledgements. This work is supported by Ministry of education and science of the Russian Federation (project 3.6522.2017).

REFERENCES

1. Sotnikov G. V., Marshall T. C., and Hirshfield J. L. 2009 Phys. Rev. ST-AB 12, 061302
2. Sheinman I., Kanareykin A., Sotnikov G., RUPAC, MOPPA010, 2012, pp. 266-268.
3. Altmark A M and Kanareykin A D. J. Phys.: Conf. Ser. 357 012001

MITIGATION STRATEGY AGAINST NUCLEAR AND RADIATION TERRORISM IN NIGERIA

A.C. Nnodi, S.V.Belyavsky, R.J. Soja

Scientific Supervisor: R.A. Laas

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail:adeamann@yahoo.com

**СТРАТЕГИЯ СНИЖЕНИЯ РИСКОВ ПРОТИВ ЯДЕРНОГО И РАДИАЦИОННОГО ТЕРРОРИЗМА
В НИГЕРИИ**

А.Ч. Нноди, С.В.Белявский, Р.Дж. Соя

Научный руководитель: Р.А. Лаас

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail:adeamann@yahoo.com

***Аннотация.** Распространение оружия массового поражения несёт угрозы миру и национальной безопасности каждого государства. Террористическая активность в мире ставит новые требования к обеспечению физической безопасности ядерных и радиоактивных веществ для развитых государств. Нигерия – член МАГАТЭ, развивающий ядерные технологии для образования и промышленности, а в будущих планах страны – для выработки электроэнергии. Действия террористической исламистской секты «Бoko Харам» в северо-восточной части страны вынуждают серьёзно рассматривать угрозу атаки на объекты ЯТЦ с целью завладеть ядерными материалами и радиоактивными веществами. В этой работе проведён анализ угроз террористических атак в Нигерии с учётом местоположения объектов и маршрутов перемещения ЯМ и РВ между ними. Рассмотрена деятельность группировки «Бoko Харам», национальное законодательство Нигерии в области обращения с ЯМ и РВ, а также участие в международных договорах и соглашениях по нераспространению.*

Introduction. An attack by terrorist on radiological or nuclear facilities could result in the release of radiation and/or possible loss of control of radioactive material; this in turn, could result in harm to the public and the environment. Considering the activities of the radical Islamic sect “Boko Haram” north eastern Nigeria and their affiliation to the terror group al-Qaeda, there is a need to secure and safeguard nuclear facilities and radiation sources. Appropriate plans aimed at ensuring that terrorist groups do not gain possession of radioactive materials that could be used in the production of weapon of mass destruction WMD need to be implemented.

This paper seeks to highlight the security challenges to nuclear technology applications in Nigeria. The use of nuclear and radioactive source in the country is on the increase. This paper will identify applications of Sources in education and industry within Nigeria. The Sources used, industry and application of this Sources are highlighted. Furthermore, the paper demonstrates Nigeria’s commitment to the safety, security and safeguards of nuclear and radioactive facilities and activities. Strategies aimed at bolstering security and eliminating threats to nuclear facilities were discussed.

Brief overview of nigeria. Nigeria is the most populous nation in Africa with over 170 million, situated on the Gulf of Guinea, with capital city-Abuja,36 states,6 geopolitical zones, with 3 major languages comprises of (Hausa, Igbo, and Yoruba),the country has four major International Airport through which goods and services are imported into the country, namely: (Abuja, Lagos, Port-Harcourt and Kano) with major sea ports (Port-Harcourt, Calabar, Lagos and Warri) the country also has neighbouring countries (Benin, Niger, Cameroon and Chad). Figure 1 shows the Maps of Nigeria.

Brief history of boko haram terrorism in nigeria. Nigeria is the most populous black Nation of Africa that has been known to be relatively peaceful and free from terrorism until the rise of Boko Haram in 2009 after the death of their leader Mr Mohammad Yusuf Mohammed who was killed by Nigerian police. Since then, the group has been fighting the government; his death took a different magnitude through an increase of bomb detonation in many locations such as villages, towns, religious gathering and market places amongst others[1].

Boko Haram was discovered to have an international affiliation with the broader al-Qaeda network. Members of Boko Haram are also believed to have trained in Afghanistan with the help of al-Qaeda [2]. In 2002, Osama bin Laden send one of his aides to Nigeria to distribute the sum of \$3 million to sympathetic Salafi groups, among the recipients was late Mohammed Yusuf who was the Boko Haram's founder [3]. Intelligent data gathered by the United States Government, suspects there could be communications training, and weapons links among the group known as Boko Haram, and al-Qaeda in the Arabian Peninsula in Yemen, al-Shabaab and al-Qaeda in the Islamic Maghreb (AQIM) [4]. "The activities of Boko Haram poses enormous threat to Nigeria's high risk nuclear facilities."



Fig. 1. Area of Boko Haram terrorist attack in North east Nigeria [5]

Uses of radioactive source and nuclear materials in nigeria. Nuclear applications are growing fast in Nigeria. Currently, there are over four thousand radioactive sources used in various applications in the country. Radioactive sources mostly used are Cs-137, Co-60, Am-241, Tc-99 among others. Nuclear materials are widely used for oil exploration in the southern region for oil explorations and non-destruction testing NDT. Also, Nigeria has a 30kw tank in pool miniature neutron source reactor MNSR known as NIRR-1 built by China which uses 1085 kg and 90% of highly enriched uranium HEU as fuel. NIRR-1 is used for research and training, neutron activation analysis and for the production of isotopes.

In October 30th 2017, the Government through the Nigeria Atomic Energy Commission (NAEC) signed a memorandum of understanding with the ROSATOM to built Russian design nuclear reactor VVER 1000 [6].

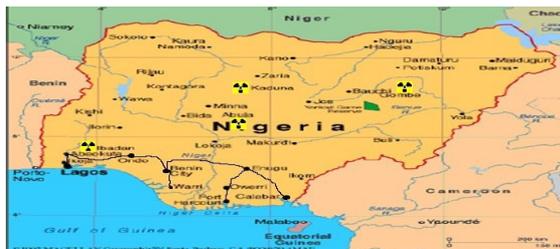


Fig.2. Map showing locations and transport routes of radioactive sources

Nuclear security and safeguards in Nigeria. Regulatory oversight is one of the core functions of the Nigerian Nuclear Regulatory Authority (NNRA) as provided by the Act of 1995, which establishes the Authority [7]. Nigeria signed and ratified the Convention on Physical Protection of Nuclear Material and Nuclear Facilities (CPPNM/NF) which came into force in May 2016. In order to domesticate the provisions of the CPPNM, the NNRA commenced the development of Regulations on Physical Protection of Nuclear Material and Nuclear Facilities in 2013. In year 2013/2014 and 2015/2016 under review, the NNRA conducted depleted Uranium (DU) survey across Nigeria as part of country's commitment with respect to its obligation to the IAEA on nuclear material accounting and control (NMAC) [8].

National and international legal framework. Nigerian Government has made a decision to generate electricity from nuclear power plant and also has ratified necessary instruments and is committed to international best practices and requirements for nuclear safety, security, safeguards and liability regimes.

Mitigation strategy against nuclear and radiation terrorism attack by Nigeria government. The following effort made by the government of the above: "Existence of effective and independent regulatory body, sustained implementation of return to supplier principle, acceptance of replacement of HEU with LEU for the research reactor, establishment of portal monitoring at the ports, continued training of staff, frontline officers, the lawyers and the Press, maintenance of regular inspections and sustaining the licensing process"

Conclusion. There has been existence of effective and independent regulatory body. Nigeria has signed and rectified various conventions and treaties of the (IAEA). The Government of Nigeria has signed MOU with the (U.S.DOE), in collaboration with the IAEA and the Chinese government for core conversation of NIRR-1 from HEU to LEU as a means to minimize the possible risk of terrorist attack in the facility. Physical security upgrades are also carried out quarterly with the help of U.S DOE in Nigeria high risk nuclear facilities.

REFERENCES

1. Amnesty International.(2015) retrieved 2015 from <https://www.amnesty.org/en/latest/news/2015/01/boko-haram-glance/>
2. Curbing Violence in Nigeria (II): The Boko Haram Insurgency, International Crisis Group, p. 23 – 24 Ibid. p. 23
3. Boko Haram's Bin Laden Connection', Daily Beast, 11 May 2014, available at <http://www.thedailybeast.com/articles/2014/05/11/boko-haram-sbin-laden-connection.html>
4. 'Abubakar Shekau', United States Department of State – Rewards for Justice, available at http://www.rewardsforjustice.net/english/abubakar_shekau.html
5. Stratfor worldview, Retrieved February 20, 2018 from <https://worldview.stratfor.com/>
6. Russia and Nigeria signed nuclear power development agreement: <http://www.rosatom.ru/en/press-centre/news/russia-and-nigeria-signed-nuclear-project-development-agreements/>
7. Nigerian Nuclear Regulatory Authority. (1995). Nuclear safety and radiation protection Act of 1995
8. Dr Nasiru. Deen. Bello (2017): <https://www-pub.iaea.org/MTCD/Meetings/PDFplus/2017/cn254/cn254-BookOfSynopses.pdf> pp 74

**ROLE OF LOCALIZED STATES DUE TO NANOPARTICLE INCLUSION IN FORMATION
OF ELECTRICAL CONDUCTIVE PROPERTIES OF NANOCOMPOSITE MATERIALS**N.S. Dyuryagina

Scientific Supervisor: Prof., Dr. A.P. Yalovets

South Ural State University (National Research University), Russia, Chelyabinsk, Lenin str., 76, 454080

E-mail: nsdiuriagina@susu.ru**РОЛЬ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ СОСТОЯНИЙ, ОБУСЛОВЛЕННЫХ ВКЛЮЧЕНИЕМ
НАНОЧАСТИЦ, В ФОРМИРОВАНИИ ПРОВОДЯЩИХ СВОЙСТВ
НАНОКОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ**Н.С. Дюрягина

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. А.П. Яловец

Южно-Уральский государственных университет (Национальный исследовательский университет),

Россия, г. Челябинск, пр. Ленина, 76, 454080

E-mail: nsdiuriagina@susu.ru

***Аннотация.** В рамках модели Роуза-Фаулера исследована роль локализованных состояний в проводящих свойствах нанокпозиционных материалов при радиационном воздействии. На примере нанокпозиционных с дырочной (полиметилметакрилат (ПММА) + CdS) и электронной (α -Al₂O₃+SrO) проводимостями, а также чистых ПММА и α -Al₂O₃, было показано, что мелкие ловушки влияют на скорость релаксации к равновесному значению радиационной электропроводности, а доля глубоких ловушек, глубина которых много больше kT , на чувствительность к поглощенной дозе ионизирующего облучения. Показано, что наиболее перспективными для дозиметрии являются нанокпозиции на основе оксида алюминия, в которых концентрация примесных центров, обусловленных наночастицами, не превышает концентрацию собственных локализованных состояний, а размер наночастиц не превышает ~ 2 нм.*

Introduction. Electrophysical properties of dielectrics and semiconductors are determined by kinetics of charge carriers, which depends on the spectrum of localized states specified by different structural defects. For example, polymethylmethacrylate (PMMA) has an exponential spectrum of localized states for holes [1, 2], while the spectrum of localized centers of aluminum oxide includes only deep traps for electrons, that makes possible the usage of this material in dosimetry [3, 4].

The introduction of nanoparticles into dielectric matrix material leads to an appearance of additional localized states, which stem from the formation of the potential well due to a difference in Fermi levels of materials at the nanoparticle-matrix interface (impurity traps). In contrast to intrinsic localized traps in the matrix, the concentration and energy spectrum of impurity traps can be changed by varying the concentration and size of nanoparticles. As a result, the nanocomposite materials with new properties can be created.

Based on PMMA+CdS nanocomposite material different photogalvanic and optoelectronic devices are created [5]. Since high-radiation conditions should not affect the instrumental data of these devices, the question about radiation resistance of PMMA+CdS arises. On the other hand, corundum and nanocomposite materials on

its basis are sensitive to radiation and able to register and save information about absorption dose for a long time, until the sample is exposed to external effects, for example, by heating.

In connection with above-mentioned, the task about electrophysical properties of nanocomposite materials under radiation exposure appears.

Rouse-Fowler equation system describes the kinetics of charge carriers in the band gap and allows us to describe different electrophysical properties of a dielectric material. In the frame of Rouse-Fowler model, the radiation electrical conductivity of polymer materials [1, 6] and the dose dependence of thermostimulated luminescence of the pure aluminum oxide under radiation effect with low dose rates [3, 4] were investigated. The existing solutions of Rouse-Fowler equation system consider only pure materials, where energy spectrum of traps has one or two energy levels [3, 4], or the case, where trap energy distribution follows the exponential law [1, 6]. To describe the electrophysical properties of nanocomposite materials we need to solve Rouse-Fowler equation system for a random spectrum of localized states [7, 8].

This work aims to investigate physical processes, which determine the role of localized states of the pure PMMA and aluminum oxide, as well as nanocomposite materials made of them, in formation its electrical properties under gamma-rays exposure with low and big dose rates. By knowing these physical processes, we could evaluate the possibility of application of these materials in dosimetry.

Mathematical model. Properties of polymer materials are well understood. In polymer the distribution of intrinsic localized states, which stem from defects of the matrix materials, follows the exponential law [1]. To calculate the energy spectrum of localized states originated from the spherical nanoparticle introduction into the matrix material, we solved the Schrodinger equation with the potential of quantum dot [7, 8].

The kinetics of charge carriers in nanocomposite materials is described in the frame of Rose-Fowler model, which including following processes: the charge carrier generation, the capture of charge carrier by localized states and the thermal release of charge carrier from them.

It is important to note, that we consider only low values of absorbed energy (below 103 J/kg), so the heating does not exceed a few Kelvin degrees. It allows us to neglect the temperature effects. Radiation damages are not considered, so the concentration of localized centers is constant.

Results and conclusion. The nanocomposites are promising materials because of the possibility of controlling the energy spectrum of impurity localized states, which due to the nanoparticle inclusion.

The large relaxation time to equilibrium state makes PMMA unsuitable for dosimetry. PMMA+CdS nanocomposite material returns to the equilibrium state fast, but this nanocomposite material is not able to accumulate the information about the absorbed radiation energy.

From the dosimetry point of view, aluminum oxide has the most suitable energy spectrum of localized states. In case of the introduction of SrO nanoparticles with concentration of less than 1 vol. %, the basic role in the accumulation of charge carriers is played by the intrinsic trap with the energy of 1,3 eV (this trap is partially filled after annealing). After irradiation even with the absorbed energy of 20 J/kg (prolonged irradiation with the low absorbed dose rate) the trap is almost completely filled, which makes it difficult to accumulate charge carriers in case of longer irradiation. In the case of pulsed irradiation, when the basic process of relaxation to equilibrium state is the charge carrier recombination, the population of the intrinsic trap with the energy of 1,3 eV does not exceed 30 % even with the absorbed dose rate 105 J/kg.

Taking into account all the above mentioned, the creation of the nanocomposite materials should meet the following requirement: the concentration of the impurity localized states, which stems from the nanoparticle introduction, should not exceed the concentration of the intrinsic localized states of the matrix material. The nanoparticle dimensions should not exceed ~2–5 nm. The large size of nanoparticles leads to the formation of the large proportion of small traps in the energy spectrum of impurity localized states, that makes the relaxation time long, so the material will not be sensitive to the absorbed radiation energy.

This study was supported in part by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation (research work of South Ural State University (Research University)) under state assignment no. 3.9684.2017/BP (no. 2017122-GZ)

REFERENCES

1. Vannikov A.V., Matveev V.K., Sichkar' V.K., Tyutnev A.P. (1982) Radiatsionnye effekty v polimerakh. Elektricheskie svoystva (Radiation effects in polymers. Electrical properties). Moscow, Nauka Publ., 273 p. (in Russ.).
2. Tyutnev A.P., Saenko V.S., Pozhidaev E.D., Ikhsanov R. (2015). Experimental and Theoretical Studies of Radiation-Induced Conductivity in Spacecraft Polymers. IEEE TRANSACTIONS ON PLASMA SCIENCE, vol. 43, no 9, pp. 2915–2924.
3. Kortov V.S., Milman I.I., Nikiforov S.V. (2000) Solid state dosimetry. Bulletin of the Tomsk Polytechnic University, vol. 303, pp. 35–45. (in Russ.).
4. Nikiforov S.V., Kortov V.S. (2014). Simulation of sublinear dose dependence of thermoluminescence with the inclusion of the competitive interaction of trapping centers. Physics of the Solid State, vol. 56, no. 10, pp. 2064–2068.
5. Shamilov P.P., Galyametdinov Yu.G. (2013). Polymethylmethacrylate composite materials based on CdSe or CdSe/CdS quantum dots synthesized in a water-ethanol medium. Bulletin of the Technological University, vol. 16, no 15, pp. 322–324. (in Russ.).
6. Rouse A. (1963) Concepts in photoconductivity and allied problems.. – New York : Interscience Publishers, 168 p.
7. Dyuryagina N.S., Yalovets A.P. (2017). Using Rouse-Fowler model to describe radiation-induced electrical conductivity of nanocomposite materials. J. Phys.: Conf. Ser., vol. 830, no. 1. – pp. 12130-12136
8. Dyuryagina N.S., Yalovets A.P. Radiation-induced electrical conductivity of nanocomposite materials. Journal of technical physics, vol. 88, no. 6. – pp. 864-873 (in Russ).

**THE ROLE OF ELECTROPHORETIC DEPOSITION METHOD IN THE CREATION
OF A BIOCOMPOSIT BASED ON HYDROXYAPATITE LAYERS AND SILVER NANOPARTICLES**

A.A. Sharonova

Scientific Supervisor: Dr. R.A. Surmenev

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: rsurmenev@mail.ru

**РОЛЬ МЕТОДА ЭЛЕКТРОФОРЕТИЧЕСКОГО ОСАЖДЕНИЯ В СОЗДАНИИ
БИОКОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ СЛОЕВ ГИДРОКСИАПАТИТИ И НАНОЧАСТИЦ
СЕРЕБРА**

А.А. Шаронова

Научный руководитель: к.ф.-м.н. Р.А. Сурменев

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: rsurmenev@mail.ru

***Аннотация.** Работа посвящена созданию многофункционального биокompозита, состоящего из покрытия на основе гидроксиапатита (ГА) и наночастиц серебра с использованием высокотехнологичных методов обработки поверхности. Высокочастотное магнетронное распыление использовалось для получения слоев ГА покрытия с различной толщиной и структурой на титане и наночастицах серебра. Для получения антибактериального слоя наночастиц серебра использовался метод электрофоретического осаждения. Наночастицы серебра имели сферическую форму с диаметром 70 ± 20 нм и ζ -потенциалом -20 мВ. Дифракционные картины биокompозитов выявили пики кристаллического ГА и серебра (Ag). Так же установлено, что наночастицы серебра являются кристаллическими с размером кристаллитов 14 нм.*

Introduction. Metals have a long history in the treatments of dentistry, dental and orthopedic treatment. The number of implants placed in the jaws is constantly increasing due to promoting development of novel materials and techniques based on collective clinical experience. It is commonly known that the foreign objects implanted in human body may be rejected due to different reasons such as wide range of local tissue reactions, in particular, inflammation, giant cell formation and fibrosis [1]. Silver nanoparticles (Ag-NPs) have been widely used for the disinfection and prevention of pathogenic bacteria. A major factor that determines the success of dental implantation is osseointegration, which is a stable anchorage of an implant in living bone achieved by direct bone-to-implant contacts [1, 2]. Consequently, the task of biomedical materials scientists is the formation of biocompatible and antibacterial implant surfaces for medical purposes. Our strategy is therefore based on the layer-by-layer preparation of coatings based on hydroxyapatite that contain internal silver nanoparticles as an antibacterial agent. The radio-frequency (RF) magnetron sputtering method was used to deposit the HA coatings [3]. The first and third HA layer were deposited for 8 and 2 h onto a titanium substrate and layer of Ag-NPs, respectively. Electrophoretic deposition (EPD) method was used to deposit the layer of Ag-NPs. Researchers developed several methods for depositing various metallic and semiconducting NPs onto the sample surfaces

using chemical reduction [4], radiation [5], electrochemical deposition [6], ion beam assisted deposition, pulsed laser ablation, and chemical vapor deposition [7]. Among all these methods, electrophoretic deposition has been largely used for the preparation of some metallic layers due to the versatility, low cost, and controllable processing of this method.

Materials and methods. To deposit the HA coatings a commercially available apparatus with an RF (13.56 MHz, COMDEL) magnetron source was used. The first and third HA layers were deposited for 8 and 2 h onto a titanium substrate and layer of Ag-NPs, respectively. Electrophoretic deposition method was used to deposit the layer of Ag-NPs. The coating of HA was deposited at an RF power level of 500 W in an argon atmosphere at the pressure of argon 0.4 Pa for either 8 or 2 h, which resulted in a layer thickness of 900 ± 100 or 150 ± 30 nm, respectively. The negatively charged Ag-NPs were synthesized by wet chemical reduction method of silver nitrate using glucose as a reductant and polyvinylpyrrolidone (PVP) as a stabilizer. PVP-stabilized Ag-NPs had a spherical shape with a diameter of the metallic core of 70 ± 20 , ζ - potential of -20 mV, and polydispersity index of -0.195, indicating the absence of large agglomerates and presence of a monodisperse system. The total amount of silver in the coatings after EPD was determined by atomic absorption spectroscopy (AAS) after the complete dissolution of all layers in concentrated aqueous HNO_3 (65 wt%); the results of the study are shown in figure 1. Variable parameters in the EPD process were: deposition time (t), working voltage (U), concentration of working solution (c) and distance between the anode and cathode (d).

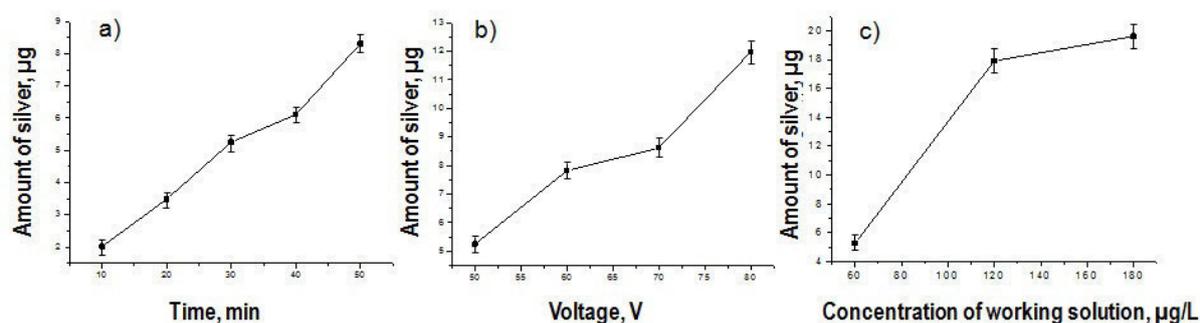


Fig. 1. Dependence of the silver amount at the surface of HA coating (thickness of 900 ± 100 nm) deposited by RF-magnetron sputtering during 480 min on the following EPD parameters: a) deposition time ($U=50$ V, $d=1.5 \pm 0.5$ mm, $c=60$ mg/l); b) working voltage ($t=30$ min, $d=1.5 \pm 0.5$ mm, $c=60$ mg/l); c) concentration of working solution ($U=50$ V, $t=30$ min, $d=1.5 \pm 0.5$ mm).

Results. Figure 1 suggests that after 30 minutes in case a) the amount of silver reaches a value of 5.3 ± 0.2 µg, while in case b) with an increase in the working voltage to 80 V, the amount of silver reaches a value of 12.1 ± 0.7 µg, as in case c) the increase in the concentration of working solution up to 180 µg/L leads to an increase in the amount of silver, which attain a value of 19 ± 1 µg. Nevertheless, there are limitations associated with the electrical conductivity of the working solution, working voltage, and concentration of the working solution. Therefore, it is not always possible to use a high working voltage for the working solution containing the water. On the other hand, a gradual increase in the concentration of the working solution with time leads to its oversaturation. In the same way, using a long period of Ag-NPs deposition is not advantageous from an economic point of view. The results of AAS showed a high content of silver on the HA coating surface with distance between anode and cathode of 1 mm which amounts to 5.714 µg/cm², while for 3 mm this value

amounts to $0.761 \mu\text{g} / \text{cm}^2$. Thus, choosing the minimum distance between the anode and the cathode is the most effective to form a monolayer of Ag-NPs on the surface of the HA coating. The final step in the formation of the Ag-HA biocomposite was a thin HA coating deposition on the surface of the Ag-NPs layer, the deposition time was 2 h, the thickness of the deposited HA coating was $150 \pm 30 \text{ nm}$.

Conclusion. In this study, multilayer Ag-HA biocomposites were produced in three sequential steps. The first step was the preparation of a nanocrystalline $900 \pm 100 \text{ nm}$ thick HA coating by RF magnetron sputtering on the titanium substrates. Next step was the EPD of Ag-NPs onto the HA-coated titanium. The final step was the deposition of the HA layer $150 \pm 30 \text{ nm}$ thick on top of the Ag-NPs layer. The negatively charged Ag-NPs were synthesized by wet chemical reduction method. PVP-stabilized Ag-NPs had a spherical shape with a diameter of the metallic core of 70 ± 20 , ζ - potential of -20 mV . EPD method was largely used for the preparation of some metallic layers due to the versatility and controllable processing of this method.

The authors are thankful to Prof. M. Epple, Dr. Kateryna Loza and Dr. Oleg Prymak, University of Duisburg-Essen, Germany and Dr. Maria Surmeneva for the assistance with SEM and XRD measurements. This research was supported by the Russian Science Foundation (15-13-00043), Russian President scholarship (SP-444.2016.4) and Euro-Russian Academic network for generous support in the framework of the Eranet Mundes program.

REFERENCES

1. Hanawa T. (2010) Biofunctionalization of titanium for dental implant. *Japanese Dental Science Review*, vol. 46, no. 2, pp. 93–101.
2. Guo C.Y., Matinlinna J.P., Tang A.T.H. (2012, March 20). Effects of Surface Charges on Dental Implants: Past, Present, and Future. *International Journal of Biomaterials*, vol. 2012, Article 381535. Retrieved February 20, 2018, from <https://www.hindawi.com/journals/ijbm/2012/381535/>
3. Surmeneva M.A., Sharonova A.A., Chernousova S., Prymak O., Loza K., Tkachev M.S., Shulepov I.A., Epple M., Surmenev R.A. (2017) Incorporation of silver nanoparticles into magnetron-sputtered calcium phosphate layers on titanium as an antibacterial coating. *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, vol.156, pp.104–113.
4. Xin F., Li L. (2011) Decoration of carbon nanotubes with silver nanoparticles for advanced CNT/polymer nanocomposites. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, vol. 42, pp. 961–967.
5. Wang S., Gong Q., Zhu Y., Liang J. (2009) Preparation and photocatalytic properties of silver nanoparticles loaded on CNTs/TiO₂ composite. *Applied Surface Science*, vol. 255, pp. 8063–8066.
6. Mi H., Xu Y., Xiao F., Zhang X. (2010) Synthesis, characterization and electrochemical behavior of polypyrrole/carbon nanotube composites using organometallic-functionalized carbon nanotubes. *Applied Surface Science*, vol. 256, pp. 2284–2288.
7. Alimohammadi F., Gashti M.P., Shamei A., Kiumarsi A. (2012) Deposition of silver nanoparticles on carbon nanotube by chemical reduction method: Evaluation of surface, thermal and optical properties. *Superlattices and Microstructures*, vol. 52, no.1, pp. 50–62.

**ИЗМЕНЕНИЕ СТРУКТУРЫ И ФАЗОВОГО СОСТАВА В МАТЕРИАЛЕ СВАРНОГО ШВА
СТАЛИ 12X18H10T ПОД ДЕЙСТВИЕМ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ***

Н.В.Абабков^{1,2}, Е.Л. Никоненко^{3,4}, Н.А. Попова³, А.Н. Смирнов^{1,2}

Научный руководитель: профессор, д.т.н. А.Н. Смирнов^{1,2}

¹Кузбасский государственный технический университет, Россия, г. Кемерово, ул. Весенняя, 28, 650000

²ООО «Кузбасский центр сварки и контроля», Россия, г. Кемерово, пр. Ленина, 33/2, 650055

³Томский государственный архитектурно-строительный университет,

Россия, г. Томск, пл. Соляная, 2, 634003

⁴Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: natalya-popova-44@mail.ru

**WELDING MATERIAL STRUCTURE AND PHASE COMPOSITION IN 0.12C-18Cr-10Ni-1Ti-Fe
STEEL MODIFIED BY PLASTIC DEFORMATION**

N.V. Ababkov^{1,2}, E.L. Nikonenko^{3,4}, N.A. Popova³, A.N. Smirnov^{1,2}

Scientific Supervisor: Prof., Dr. A.N. Smirnov^{1,2}

¹Kuzbass State Technical University, Russia, Kemerovo, Vesennaya street, 28, 650000

²LLC “Kuzbass Center of Welding and Control”, Russia, Kemerovo, Lenin avenue, 33/2, 650055

³Tomsk State University of Architecture and Building, Russia, Tomsk, Solyanaya square, 2, 634003

⁴National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia, Lenin avenue, 3, 0634050

E-mail: natalya-popova-44@mail.ru

Abstract. The paper presents the transmission electron microscopy (TEM) investigations of the structure and phase composition of the heat-affected zone (HAZ) in welded joint obtained by electrode welding. The type 12C-18Cr-10Ni-1Ti-Fe steel is used for welding which then subjected to plastic deformation. Quasi-static tensile tests are performed on a test machine Instron-1185. The acoustic emission and acoustic decay are respectively recorded and measured using the acoustic surface wave technique before and after the load application. TEM investigations are carried out within HAZ between the deposited and base metal at a 0,5 mm distance from the weld joint at 0, 5 and 37% deformation degrees. Thus, it is shown that in the area of the heat-affected zone, the plastic deformation leads to the martensite transformation as follows: $\gamma \rightarrow \varepsilon \rightarrow \alpha$.

Введение. Известно, что наиболее опасными местами в сварных соединениях являются места стыков наплавленного и основного металлов. Именно такие места являются наиболее опасными концентраторами напряжений, которые приводят к образованию трещин и различных дефектов, что существенно снижает прочность и надежность сварного изделия. Знание структурно-фазового состояния материала сварного шва позволит не только оценить прочностные свойства сварного изделия в целом, но и даст возможность прогнозировать поведение сварного соединения в процессе его эксплуатации, а

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта № 14-19-00724 Российского Научного Фонда

особенно при деформации, которой часто подвергаются сварные изделия. Поэтому качеству сварных соединений и их надежности до сих пор уделяется большое внимание.

Целью настоящей работы явилось исследование структурно-фазового состояния материала сварного шва на расстоянии 0,5 мм от стыка наплавленного и основного металлов после пластической деформации.

Материал и методы исследования. Объектом исследования являлся материал сварного соединения, выполненного ручной дуговой сваркой. Свариваемый металл – сталь аустенитного класса 12X18H10T. Сварка проведена сварочным электродом ЦЛ-11. Изучение структуры металла сварного шва проводилось на расстоянии 0,5 мм от границы сплавления. Механические испытания на квазистатическое активное растяжение проводились при комнатной температуре на универсальной испытательной машине Instron 1185 со скоростью $1,7 \times 10^{-4} \text{ с}^{-1}$ до степеней деформации $\varepsilon = 0, 5$ и 37% на плоских образцах с размером рабочей части $200 \times 15 \times 5 \text{ мм}^3$. Сварной шов был перпендикулярен оси растяжения и находился в середине рабочей части образца. Изучение проводилось методом просвечивающей дифракционной электронной микроскопии на тонких фольгах с применением электронного микроскопа ЭМ-125 при ускоряющем напряжении 125 кВ. Рабочее увеличение в колонне микроскопа составляло 25000 крат.

Определение всех количественных параметров структуры и фазового состава проводилось по известным методикам с использованием изображений, подтвержденным микродифракционными картинками и темнопольными изображениями, полученными в рефлексах соответствующих фаз.

Полученные результаты. Было установлено, что в исходном состоянии ($\varepsilon = 0$) матрица материала представляет собой γ -фазу (аустенит) – твердый раствор одновременно замещения и внедрения на основе γ -Fe, имеющий гранецентрированную кубическую кристаллическую (ГЦК) решетку. Аустенит (γ -фаза) присутствует в виде зерен разного типа: 1) зерна с механическими (или деформационными) микродвойниками (рис.1а), обладающими ГЦК кристаллической решеткой с параметром, равным параметру кристаллической решетки γ -фазы (аустенита); 2) зерна с пластинчатыми выделениями ε -мартенсита (рис.1б), который обладает гексагональной плотноупакованной (ГПУ) кристаллической решеткой и 3) зерна, содержащие одновременно микродвойники и ε -мартенсит (рис.1в).

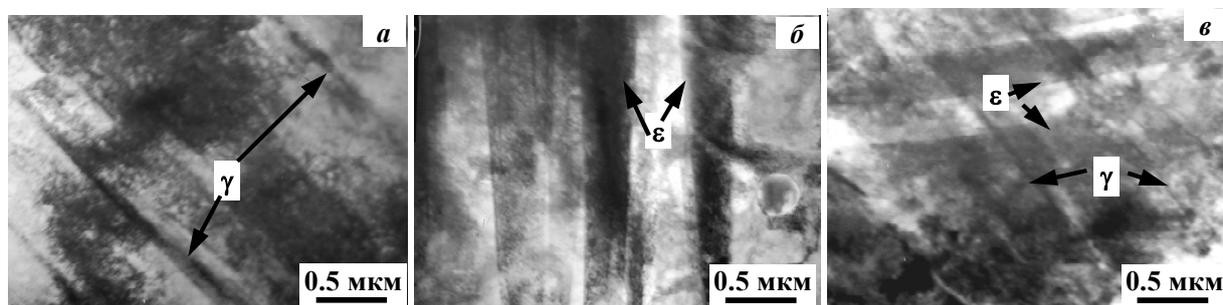


Рис.1. Электронно-микроскопическое изображение аустенитного зерна с микродвойниками (а), с пластинами ε -мартенсита (б) и с микродвойниками и ε -мартенситом (в), $\varepsilon = 0$

Как микродвойники, так и ε -мартенсит имеют вид пакетов из плоских пластин правильной геометрической формы с четкими границами, которые располагаются параллельно друг другу в

определенном направлении и имеют плоскость габитуса типа $\{111\}$ аустенита. Объемная доля зерен первого типа в объеме материала составляет 10%, второго – 40% и третьего – 50%.

Дислокационная структура стали во всех зернах имеет вид плотных дислокационных сеток. Средняя скалярная плотность дислокаций равна $2,6 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$. Самым высоким значением скалярной плотности дислокаций ($3,4 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$) обладают зерна, содержащие механические микродвойники, самым низким ($2,4 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$) – зерна, содержащие одновременно микродвойники и ε -мартенсит.

Деформация материала сварного шва привела к существенному изменению структуры материала. Уже при $\varepsilon = 5\%$ в материале сварного шва не обнаруживается зерен первого типа, то есть зерен γ -фазы, содержащих пакеты микродвойников. Присутствуют зерна γ -фазы второго типа (содержащие пакеты пластин ε -мартенсита) и зерна третьего типа (одновременно содержащие, как правило, пересекающиеся пакеты микродвойников и ε -мартенсита). При этом доля зерен, второго типа уменьшилась до 30% от объема материала, а доля зерен третьего типа увеличилась до 70%.

Дислокационная структура, по-прежнему, во всех зернах имеет вид плотных дислокационных сеток. Скалярная плотность дислокаций возросла как во всех типах зерен, так и в среднем по материалу ($3,5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$).

Увеличение степени пластической деформации до $\varepsilon = 37\%$ привела к дальнейшему изменению структуры материала. Теперь, наряду с зернами γ -фазы третьего типа, объемная доля которых составляет, как и при $\varepsilon = 5\%$, от объема материала 70% и зерен γ -фазы с пластинами ε -мартенсита, объемная доля которых уменьшилась до 10%, в материале сварного шва присутствуют зерна α -мартенсита, обладающего ОЦК кристаллической решеткой. Объемная доля таких зерен составляет 20%, размер – $\sim 1,5$ мкм. Типичные изображения структуры сварного шва после пластической деформации при $\varepsilon = 37\%$ представлены на рис.2.

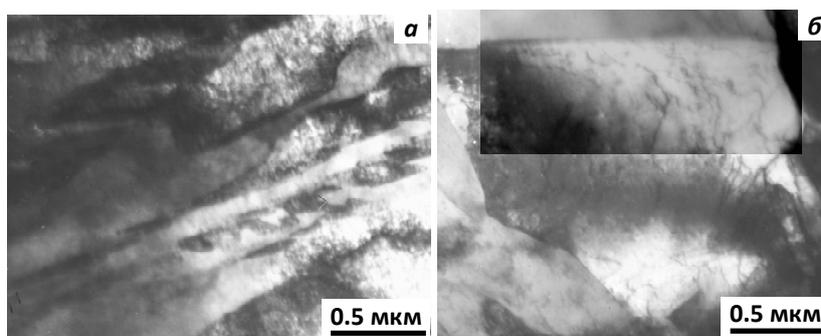


Рис.2. Электронно-микроскопические изображения зерна γ -фазы с микродвойниками и ε -мартенситом (а) и зерна α -мартенсита (б), $\varepsilon = 37\%$

Дислокационная структура, как и прежде, имеет вид плотных дислокационных сеток. Скалярная плотность дислокаций в γ -зернах продолжает увеличиваться ($3,9 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$), в зернах α -мартенсита $\rho = 1,6 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$, то есть более чем в 2 раза меньше, чем в γ -фазе. Средняя скалярная плотность дислокаций по материалу в целом несколько уменьшилась ($3,3 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$).

Заключение. Проведенные исследования методом просвечивающей электронной дифракционной микроскопии показали, что пластическая деформация сварного соединения приводит в материале сварного шва к мартенситному превращению в такой последовательности: $\gamma \rightarrow \varepsilon \rightarrow \alpha$.

**ВЛИЯНИЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ КРАТКОВРЕМЕННЫХ ОТЖИГОВ
НА СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ СОСТОЯНИЯ СТАБИЛЬНОЙ АУСТЕНИТНОЙ СТАЛИ
ПОСЛЕ ХОЛОДНОЙ ДЕФОРМАЦИИ**

С.А. Аккузин

Научный руководитель: доцент, к.ф.-м.н., И.Ю. Литовченко

Национальный исследовательский Томский государственный университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050

E-mail: s.a.akkuzin@gmail.com

**INFLUENCE OF HIGH-TEMPERATURE SHORT-TERM ANNEALING ON STRUCTURAL
PHASE STATES OF A STABLE AUSTENITE STEEL AFTER COLD DEFORMATION**

S.A. Akkuzin

Scientific Supervisor: PhD. I.Yu. Litovchenko

Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050

E-mail: s.a.akkuzin@gmail.com

***Abstract.** The influence of high-temperature short-term annealing on the features of the microstructure and mechanical properties of stable austenitic steel after cold deformation is studied. It is shown that, under these conditions, as a result of annealing recrystallized grains up to 2 μm in microtwining structure are formed. The yield strength of these structural states more than 2 times increases by the original value.*

Введение. Возможности формирования субмикро- и нанокристаллических структурных состояний с высокими прочностными и пластическими свойствами в стабильных аустенитных сталях после различных термомеханических обработок исследуются на протяжении нескольких десятилетий [1, 2]. Показано [1], что холодная прокатка 40-90 % позволяет получить структуру с микро- и нанодвойниками деформации. В работе [2] использована последовательность из низкотемпературной деформации (вблизи $T = -196$ °С) и теплой деформацией при $T = 600$ °С с целью формирования высокой плотности микро- и нанодвойников и полос локализации деформации. Указанные структурные состояния обеспечивают высокие прочностные свойства (до ≈ 1150 МПа), пластичность при этом невысокая (относительное удлинение $\approx 6-8$ %).

В [1] подробно изучено влияние высокотемпературных длительных (до 8 ч) отжигов на развитие процессов полной и частичной рекристаллизации. Отмечается, что при температурах 900 – 1000 °С наблюдается полная рекристаллизация микродвойниковой структуры, и соответственно, рост аустенитных зерен и снижение прочностных свойств. В работе [3] показана перспективность использования кратковременных циклических отжигов после термомеханических обработок, позволяющих контролировать размеры рекристаллизованных участков микроструктуры. В связи с этим, целью настоящего исследования является изучение влияния кратковременных высокотемпературных отжигов на микродвойниковую структуру и механические свойства стабильной аустенитной стали.

Материалы и методы исследования. В настоящей работе исследована хромоникелевая стабильная аустенитная сталь 02X17H14M3 (Fe-16.8Cr-14.1-Ni-0.59Si-2.7-Mo-1.7-Mn-0.013C, вес. %)

после деформации и кратковременных отжигов. Исходное состояние ($\sim 100\%$ аустенита) получено закалкой $T = 1100\text{ }^\circ\text{C}$, 1 час. В этом состоянии в стали наблюдается ячеистая дислокационная субструктура; средний размер зерна аустенита $\sim 40\text{ мкм}$. Исходный размер образцов $\sim 30 \times 20 \times 11\text{ мм}$.

Термомеханическая обработка состоит из двух этапов: пластическая деформация и высокотемпературные кратковременные отжиги. Пластическую деформацию осуществляли прокаткой при $T = 20\text{ }^\circ\text{C}$ в несколько проходов с общей степенью деформации $\varepsilon \approx 75\%$. Последующие отжиги проводили при $T = 850\text{ }^\circ\text{C}$ 4 цикла длительностью 70 и 150 с.

Электронно-микроскопические исследования проводили на просвечивающем электронном микроскопе Philips CM-12 при ускоряющем напряжении 120 кВ. Тонкие фольги готовили методом электролитической полировки в электролите, содержащем 450 мл ортофосфорной кислоты и 50 г хромового ангидрида. Механические испытания методом активного растяжения осуществляли на универсальной вакуумной испытательной машине типа Поляни с подвижным нижним захватом при комнатной температуре в воздухе со скоростью деформации $\dot{\varepsilon} \approx 2 \times 10^{-3}\text{ с}^{-1}$ при комнатной температуре с использованием образцов в форме двойных лопаток с размерами рабочей части $13 \times 2 \times 1\text{ мм}$.

Результаты. После прокатки при комнатной температуре до 75 % деформации формируется аустенитная структура с высокой плотностью микро- и нанодвойников деформации (рис. 1 а). Микро- и нанодвойники залегают в нескольких плоскостях двойникования. Указанное структурное состояние обеспечивает повышение прочностных свойств стали: предел текучести $\approx 1115\text{ МПа}$, предел прочности $\approx 1300\text{ МПа}$ и относительное удлинение $\approx 4,9 - 5,4\%$ (рис. 2).

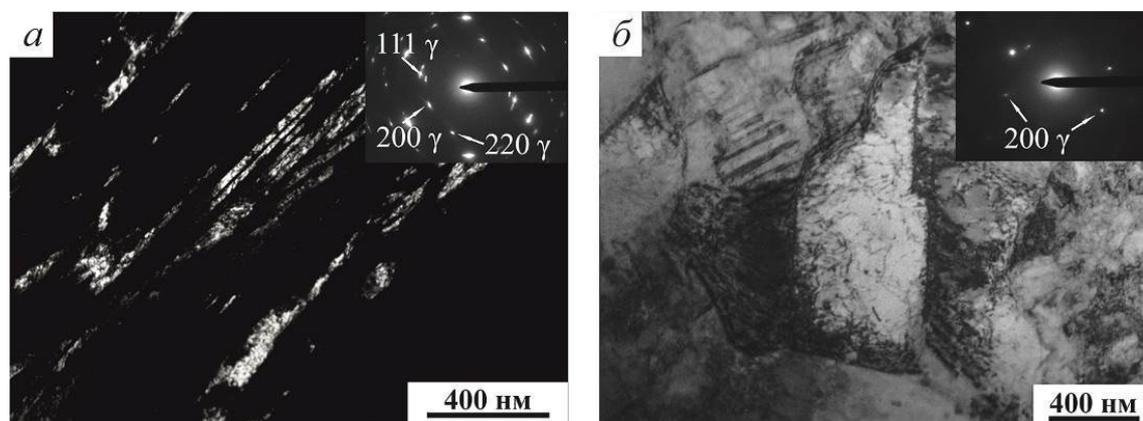


Рис. 1. Микроструктура стали 02X17H14M3 после: а) 75 % холодной деформации; б) 75 % холодной деформации + отжиг при $T = 850\text{ }^\circ\text{C}$, 4 цикла, 150 с.

Отжиги (после деформации) при температуре $T = 850\text{ }^\circ\text{C}$, 4 цикла, 70 с не приводят к существенным изменениям структуры – сохраняются микро- и нанодвойники деформации. Указанное структурное состояние обеспечивает высокие значения прочностных свойств: предел текучести $\approx 1045 - 1105\text{ МПа}$, предел прочности $\approx 1280 - 1290\text{ МПа}$. При этом относительное удлинение $\approx 4,3 - 6,5\%$.

Повышение длительности отжига до 150 с приводит к развитию процессов рекристаллизации в микродвойниковой структуре. В отдельных областях наблюдаются аустенитные зерна размером до $\approx 2\text{ мкм}$. Внутри таких зерен обнаружено множество дислокаций и фрагменты микродвойниковой

структуры (рис. 1. б). При этом предел текучести стали снижается до $\approx 643 - 743$ МПа, а предел прочности – до $\approx 868 - 944$ МПа. В результате развития в стали процессов рекристаллизации и возврата существенно увеличивается относительное удлинение до $\approx 20,6 - 28$ % (рис. 2).

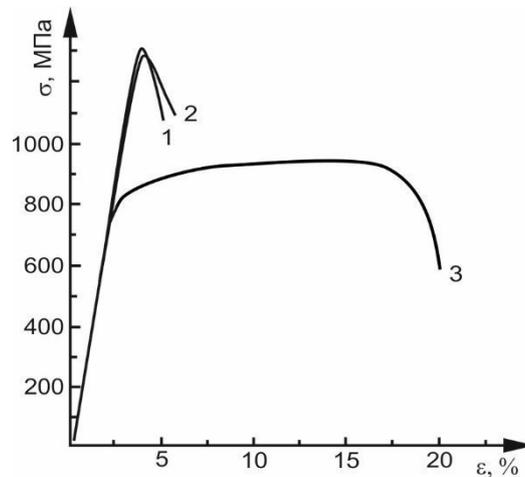


Рис. 2. Кривые $\sigma(\epsilon)$ для аустенитной стали 02X17H14M3: 1 – после 75 % холодной деформации;
2 – после 75 % холодной деформации и отжига при $T = 850$ °C, 4 цикла, 70 с;
3 – после 75 % холодной деформации и отжига при $T = 850$ °C, 4 цикла, 150 с.

Заключение. Исследовано влияние кратковременных высокотемпературных отжигов на микро- и нанодвойниковую структуру стабильной аустенитной стали 02X17H14M3. В результате отжигов при температуре $T = 850$ °C, 4 цикла длительностью 150 с в микродвойниковой структуре были сформированы частично рекристаллизованные области с размерами зерен аустенита до ≈ 2 мкм. Эти особенности микроструктуры, сочетающие микродвойниковую структуру и рекристаллизованные аустенитные зерна, обеспечивают значения пределов текучести и прочности стали более чем в 2 раза выше по сравнению с таковыми для исходного состояния.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1 Donadille C., Valle R., Dervin P., Penelle R. Development of texture and microstructure during cold-rolling and annealing of f.c.c. alloys: example of an austenitic stainless steel // Acta metal. – 1989. – V. 37. – № 6. – P. 1547–1571.
- 2 Akkuzin S.A., Litovchenko I.Yu., Tyumentsev A.N. Strengthening of Stable Cr-Ni Austenitic Stainless Steel under Thermomechanical Treatments // AIP Conference Proceedings. – 2017. – Vol. 1909. – PP. 020001-1–020001-4.
- 3 Ravi Kumar B., Das S.K., Sharma Sailaja, Sahu J.K. Effect of thermal cycles on heavily cold deformed AISI 304L austenitic stainless steel // Materials Science and Engineering A. – 2010. – V. 527. – P. 875–882.

**ВЛИЯНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ НА ПРОЦЕССЫ КОНСОЛИДАЦИИ
КЕРАМИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ОКСИДА ИНДИЯ-ОЛОВА**

Т.Р. Алишин, О.С. Толкачев

Научный руководитель: д.ф.-м.н. Э.С. Двилис

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 2, 634028

E-mail: alishin.95@mail.ru

**INFLUENCE OF TECHNOLOGICAL PARAMETERS ON THE CONSOLIDATION PROCESSES OF
INDIUM TIN OXIDE CERAMIC MATERIALS**

T.R. Alishin, O.S. Tolkachev

Scientific Supervisor: Dr. E.S. Dvilis

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 2, 634028

E-mail: alishin.95@mail.ru

***Abstract.** This work is devoted to optimization of technological processes for the production of ceramics from indium-indium oxide powder. The influence of granulation and pressure in uniaxial one-sided pressing in rigid cylindrical mold of powder materials based on indium-tin oxide on the density of sintered ceramics is studied.*

Введение. Для формирования качественной микроструктуры и требуемых свойств прозрачных проводящих покрытий из оксида индия-олова (ИТО) критичным являются параметры пористости и однородности мишеней, используемых для распыления, поэтому мишени изготавливают с применением дорогих и сложных технологических процессов (горячего изостатического прессования, электроимпульсного плазменного спекания и т.п.), обеспечивающих высокую плотность и однородность структуры. Более экономичными являются методы холодного прессования в закрытых жёстких пресс-формах. Главной проблемой этой группы методов является разрушение компактов из непластичных порошков (оксиды, шпинели, титанаты и др.) при извлечении их из пресс-формы. Одним из решений проблемы является введение в порошок веществ (пластификаторов/связующих), придающих пластичность порошковому телу и обеспечивающих более прочную связь между частицами. В качестве пластификаторов, чаще всего, используют органические вещества (поливиниловый спирт, поливинилбутираль и др.), так как их можно полностью удалить из керамики при отжиге.

Цель данной работы – количественная оценка влияния технологических параметров и условий подготовки порошка на процессы консолидации керамических материалов на основе оксида индия-олова.

Материал и методика эксперимента. В качестве исходного материала использовали нанопорошок оксида индия-олова (ИТО) высокой чистоты (Changsha Santech Materials Co., Lt, Китай, содержание основного компонента 99,99 %). По данным производителя, средний размер частиц порошка составляет 30 нм. Теоретическая плотность материала равна 7,2 г/см³.

Гранулирование порошка ИТО проводили следующим образом: исходный порошок смешивали с 10 масс. % раствором поливинилбутираля (PVB) в этаноле в массовом соотношении порошок ИТО – PVB 100/2; после смешивания порошок сушили и просеивали через сито. Для повышения значения насыпной

плотности полученный порошок прессовали при давлении 50 МПа с последующим разломом прессовок в агатовой ступке и просеиванием через сито. Прессование порошков проводили по схеме одноосного одностороннего прессования в цилиндрической пресс-форме диаметром 14 мм.

Для определения реологических свойств исследуемых порошковых материалов использовали безразмерное уравнение прессования логарифмической формы (1) [1].

$$\rho = b \cdot \ln\left(\frac{P_{np}}{P_{кр}}\right) + 1 \quad (1)$$

где ρ – относительная плотность порошкового тела, b – коэффициент, характеризующий интенсивность уплотнения порошкового тела под действием давления прессования, P_{np} – давление прессования, $P_{кр}$ – критическое давление прессования, при котором достигается беспористое состояние порошкового тела.

Коэффициенты уравнения прессования для различных порошковых материалов и условий их консолидации определяются аппроксимацией экспериментальных кривых уплотнения методом наименьших квадратов. Спекание спрессованных образцов проводили в высокотемпературной атмосферной печи ЛНТ 08/18/P310 (Nobetherm, Германия) с выдержкой в течении 1 ч при температуре 1600 °С и скоростью изменения температуры 200 °/ч. Для определения плотности, ввиду правильной геометрической формы образцов, использовали результаты взвешивания на аналитических весах, и рассчитывали объём образца, используя линейные измерения.

Результаты исследования и их обсуждение. Кривые уплотнения порошковых материалов, представленные на рисунке 1, имеют значение достоверности аппроксимации уравнением (1) не менее 99.4 %.

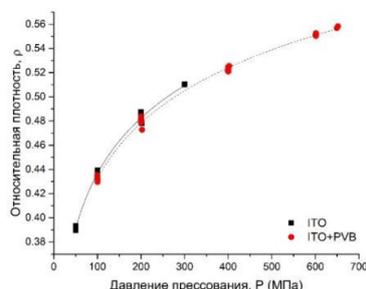


Рис. 1. Кривые уплотнения исходного (ITO) и гранулированного (ITO+PVB) порошков ITO

Коэффициенты уравнения прессования исследуемых порошков (табл. 1), показывают, что используемая технология гранулирования, не оказывает существенного влияния на интенсивность уплотнения и значение критического давления прессования. При этом, целые (без разрушений) образцы из исходного порошка можно получить при давлении прессования не более ~300 МПа, из гранулированного – не более ~600 МПа.

Таблица 1

Реологические характеристики исследуемых порошков

Смесь	Интенсивность уплотнения b	Критическое давление прессования, $P_{кр}$, МПа	R^2
ITO	0,066	492768	99,4
ITO+PVB	0,066	537192	99,5

Зависимости относительной плотности керамических образцов от плотности прессовок после свободного спекания на воздухе при температуре $1600\text{ }^{\circ}\text{C}$ и выдержке в течении часа свидетельствует о том, что плотность после спекания растёт вместе с ростом плотности порошкового тела. Использование ПВБ при гранулировании приводит к более активному спеканию. Плотность спеченных образцов из гранулированного порошка оказалась выше на $\sim 10\%$, чем у образцов из исходного порошка, полученных в тех же условиях (рис. 2а).

Феноменологическое описание спекания, предложенное В. А. Ивенсеном [2], основывается на постоянно наблюдаемой закономерности – независимости относительного сокращения объема пор от начальной плотности порошкового тела, $V_c/V_n = const$, где V_n и V_c – объемы пор в спекаемом теле до и после спекания. Автор отмечает, что свободно насыпанные и слабо уплотненные порошки обнаруживают повышенные значения V_c/V_n , объясняя это малым числом и низкой прочностью контактов между частицами. В наших экспериментах при рассмотрении зависимости V_c/V_n от давления прессования для исследуемых материалов наблюдается уменьшение V_c/V_n с увеличением давления прессования. Основной особенностью исследуемых материалов является чрезвычайно высокое значение критического давления прессования – более 500 ГПа; порошок жёсткий и постоянство V_c/V_n наблюдается только при давлении более 400 МПа, (относительное давление прессование $P_{np}/P_{кр} \sim 7,5 \cdot 10^{-4}$).

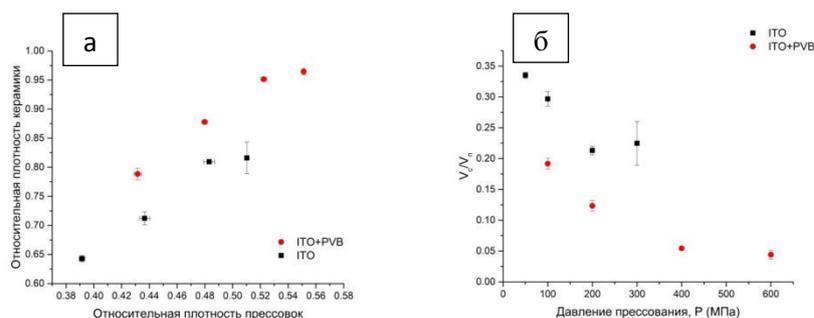


Рис. 2. Зависимость относительной плотности керамики от относительной плотности прессовок (а) и зависимость отношений объема пор в спекаемом теле до и после спекания (б).

Заключение. Таким образом, чрезвычайно высокое критическое давление прессования исследуемых материалов (более 500 ГПа), свидетельствует о том, что только при относительно высоком давлении параметры межчастичного взаимодействия в прессовках обеспечивают спекание высокоплотной керамики. Использование поливинилбутирала в качестве связующей добавки при гранулировании позволяет увеличить эффективное давление прессования более чем в 2 раза и сопровождается значительным повышением активности спекания.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Хасанов О.Л., Двилис Э.С., Качаев А.А. Метод коллекторного компактирования нано- и полидисперсных порошков: учебное пособие. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2009. – 99 с.
2. Ивенсен В.А. Феноменология спекания и некоторые вопросы теории. - М.: Изд-во «Металлургия», 1985. - 247 с.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТЕЙ ПОВЫШЕНИЯ РАБОЧИХ ТЕМПЕРАТУР ФЕРРИТНО-
МАРТЕНСИТНОЙ СТАЛИ ЭК-181 С ПОМОЩЬЮ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ
ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ**

К.В. Алмаева, Н.А. Полехина

Научный руководитель: доцент, к.ф.-м.н., И.Ю. Литовченко

Национальный исследовательский Томский государственный университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050

E-mail: kсени_я_алмаева@mail.ru

**THE STUDY OF THE POSSIBILITIES OF THE OPERATING TEMPERATURES OF FERRITIC-
MARTENSITIC STEEL EK-181 INCREASING BY HIGH TEMPERATURE
THERMOMECHANICAL TREATMENT**

K.V.Almaeva, N.A.Polekhina

Scientific Supervisor: assistant professor, PhD., I.Yu. Litovchenko

National Research Tomsk State University, Tomsk, Lenina Str.36, 634050

E-mail: kсени_я_алмаева@mail.ru

***Abstract.** High-temperature ($T = 650\text{--}800\text{ }^{\circ}\text{C}$) mechanical properties of ferritic-martensitic steel EK-181 after traditional heat treatment (normalized and tempered, N&T) and high-temperature thermomechanical treatment (HTMT) were studied. It is shown that at high test temperatures HTMT leads to an increase in the strength properties of the steel relative to N&T. At tension temperature $T = 720\text{ }^{\circ}\text{C}$ the yield strength of the steel after HTMT is higher than the corresponding values after N&T at a temperature $T = 650\text{ }^{\circ}\text{C}$. The studies of the microstructure of steel after HTMT have shown that such treatment leads to an increase in the dislocation density and in dispersion and volume fraction of nanoscale particles of vanadium carbonitride $V(C, N)$. Such particles are capable to provide thermal stability of a microstructure and enhanced values of long-term high-temperature strength of the steel. This modification of the structural and phase state of the steel can provide an increase in the expected operating temperatures.*

Введение. В настоящее время жаропрочные малоактивируемые 12 %-ные хромистые ферритно-мартенситные стали являются приоритетными конструкционными материалами для ядерных и термоядерных энергетических реакторов нового поколения [1–4]. Для сталей такого класса поставлены две задачи: повышение уровня длительной высокотемпературной прочности и снижение тенденции к низкотемпературному охрупчиванию. В последнее время показаны возможности повышения высокотемпературной прочности ферритно-мартенситных сталей с помощью ВТМО [4–6]. Однако возможности повышения рабочих температур с использованием указанной обработки исследованы недостаточно.

В настоящей работе исследованы прочностные и пластические свойства стали ЭК-181 в интервале температур от $650\text{ }^{\circ}\text{C}$ до $800\text{ }^{\circ}\text{C}$ после ТТО и ВТМО. Методами просвечивающей электронной микроскопии изучены особенности микроструктуры стали после указанных обработок.

Материалы и методы. В качестве материала для исследования была выбрана 12%-ная хромистая ферритно-мартенситная сталь ЭК-181, элементный состав которой представлен в таблице 1. ТТО включала закалку от температуры 1100 °С 1 час и отпуск при 720 °С 3 часа. ВТМО включала аустенизацию с нагревом до 1100 °С с выдержкой 1 час, горячую пластическую деформацию прокаткой до величины $\varepsilon \approx 40\text{--}50\%$ и последующий отпуск при $T = 720\text{ °С}$ в течение 1 ч.

Таблица 1

Элементный состав стали ЭК-181 (вес. %, основа Fe)

C	Cr	Mn	Mo	Nb	V	W	Ni	N	Ta	Ce	Ti	B	Zr
0.16	11.17	0.74	0.01	0.01	0.25	1.13	0.03	0.04	0.08	0.15	0.05	0.006	0.05

Механические испытания осуществляли при температуре 650–800 °С методом активного растяжения в вакууме $\sim 3 \times 10^{-3}$ Па. Образцы были изготовлены в форме двойных лопаток с размерами рабочей части $\sim 13 \times 2 \times 1$ мм. Структурные исследования проводили с помощью просвечивающего электронного микроскопа Philips CM12 при ускоряющем напряжении 120 кВ. Фольги для просвечивающей электронной микроскопии готовили методом электролитической полировки в растворе хромового ангидрида CrO_3 в ортофосфорной кислоте H_3PO_4 .

Результаты. Механические испытания на растяжение показали (таблица 2), что после ТТО при $T = 650\text{ °С}$ предел текучести стали достигает 309 МПа, предел прочности – 337 МПа, относительное удлинение 12,3%. При повышении температур испытания до $T = 800\text{ °С}$ значение предела текучести снижается на 196 МПа и составляет 113 МПа, предел прочности достигает 130 МПа, относительное удлинение 35%.

После ВТМО при $T = 650\text{ °С}$ предел текучести достигает 429 МПа, что на 120 МПа больше, чем после ТТО. Предел прочности также увеличивается относительно ТТО и составляет 476 МПа. При повышении температур испытаний прочностные свойства снижаются. При этом значения прочностных свойств после ВТМО превышают таковые после ТТО в изученном температурном интервале.

Снижение прочностных свойств стали при повышении температуры связано с уменьшением напряжения Орована за счет термически активируемых процессов преодоления наноразмерных частиц карбонитрида ванадия $\text{V}(\text{C}, \text{N})$ скользящими дислокациями [6].

Таблица 2

Механические свойства

Температура испытаний	Режим обработки					
	ТТО			ВТМО		
	Предел текучести, МПа	Предел прочности, МПа	δ , %	Предел текучести, МПа	Предел прочности, МПа	δ , %
$T = 650\text{ °С}$	309	337	12,3	429	476	11,8
$T = 700\text{ °С}$	225	244	11,2	344	381	11,5
$T = 720\text{ °С}$	211	228	28,4	316	364	9,5
$T = 800\text{ °С}$	113	130	35	172	194	12,6

Структурные исследования показали, что ВТМО приводит к увеличению плотности дислокаций, повышению дисперсности и объемной доли наноразмерных частиц карбонитрида ванадия V(C, N). При этом в ферритно-мартенситной структуре уменьшается (относительно ТТО) плотность грубодисперсных карбидов $M_{23}C_6$. Меньшая плотность указанных частиц связана с интенсивным обеднением твердого раствора углеродом при образовании наноразмерных частиц карбонитрида ванадия. Указанные частицы V(C, N) в условиях ВТМО формируются уже в процессе охлаждения после высокотемпературной деформации.

Таким образом, ВТМО повышает эффективность дисперсного и субструктурного упрочнения, что способствует повышению пределов текучести и прочности при высоких температурах. Высокая плотность наноразмерных частиц может оказывать положительное влияние на характеристики длительной высокотемпературной прочности стали, путем закрепления дефектов микроструктуры, обеспечивая ее более высокую стабильность, в том числе в условиях ползучести[5, 6].

Заключение. Показано, что ВТМО с деформацией $\varepsilon \approx 40\text{--}50\%$ ферритно-мартенситной стали ЭК-181 приводит к повышению кратковременных высокотемпературных прочностных свойств. Это обусловлено высокой плотностью наноразмерных частиц карбонитрида ванадия V(C, N) и повышенной плотностью дислокаций. При $T = 720$ °С значения предела текучести стали после ВТМО превышают таковые после ТТО при $T = 650$ °С. Это свидетельствует о возможности повышения рабочих температур стали с помощью ВТМО.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Klueh R.L., Hashimoto N., Maziasz P. J. New nano-particle-strengthened ferritic/martensitic steels by conventional thermo-mechanical treatment // *Journal of Nuclear Materials*. – 2007. – V. 367 – 370. – P. 48–53.
2. Hollner S., Fournier B., Le Pendu J., Cozzika T., Tournie I., Brachet J.-C., Pineau A. High-temperature mechanical properties improvement on modified 9Cr-1Mo martensitic steel through thermomechanical treatments // *Journal of Nuclear Materials*. – 2010. V.405. – P. 101–108.
3. Hoffman J., Rieth M., Commin L., Fernandez P., Roldan M. Improvement of reduced activation 9%Cr steels by ausforming // *Nuclear Materials and Energy*. – 2016. V.6. – P. 12–17.
4. Полехина Н.А., Литовченко И.Ю., Тюменцев А.Н., Кравченко Д.А., Чернов В.М., Леонтьева-Смирнова М.В. Влияние высокотемпературной термомеханической обработки в аустенитной области на микроструктуру и механические свойства малоактивируемой 12%-ной хромистой ферритно-мартенситной стали ЭК-181 // *Журнал технической физики*. – 2017. Том 87. – Вып. 5. – С. 716–721.
5. Litovchenko I.Yu., Polekhina N.A., Tyumentsev A.N., Astafurova E.G, Chernov V. M., Leontieva-Smirnova M. V. The effect of heat treatment on the microstructure and mechanical properties of heat-resistant ferritic-martensitic steels EK-181 and Chs-139 // *Journal of Nuclear Materials*. – 2014. – V. 455. – P. 665–668.
6. Полехина Н.А., Литовченко И.Ю., Тюменцев А.Н., Кравченко Д.А., Чернов В.М., Леонтьева-Смирнова М.В. Микроструктура, механические свойства и особенности разрушения малоактивируемой ферритно-мартенситной стали ЭК-181 в интервале температуры от -196 до 720 °С // *ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез*. – 2017. – Т. 40. – Вып. 4. – С. 92–102.

ВОЗДУШНО-ПЛАЗМЕННАЯ РЕКОНВЕРСИЯ ГЕКСАФТОРИДА ОБЕДНЕННОГО УРАНА

Е.С. Алюков, Н.В. Тундешев

Научный руководитель: доцент, к.ф.-м.н. А.Г. Каренгин

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: john.judo@mail.ru

AIR-PLASMA RECONVERSION OF DEPLETED URANIUM HEXAFLUORIDE

E.S. Alukov, N.V. Tundeshev

Scientific Supervisor: lecturer, Phd. A.G. Karengin

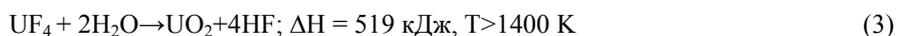
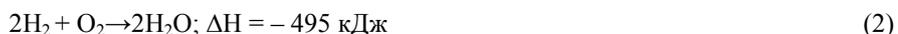
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: john.judo@mail.ru

***Annotation.** The possibility of plasma-chemical conversion of depleted uranium-235 hexafluoride (DUHF) in air plasma in the form of gas-air mixtures with hydrogen is considered in the article. Calculation of burning parameters of gas-air mixtures and the mode for energy-efficient conversion of DUHF to UO_2 in air plasma are carried out. The results of the conducted researches can be used for creation of plasma-chemical conversion of DUHF technology.*

Введение. Реконверсия гексафторида урана, обедненного по изотопу уран-235, (ОГФУ) в оксиды урана является актуальной и технически сложной задачей, решением которой занимаются многие страны, использующие атомную энергетику. Единственная промышленная технология реконверсии ОГФУ, основанная на последовательном гидролизе ОГФУ до уранилфторида и пирогириролизе уранилфторида до закиси-оксида урана (ЗОУ), имеет целый ряд недостатков: многостадийность, высокие энерго- и трудозатраты, значительная потребность в химических реагентах (перегретый водяной пар, азот, водород), невозможность одностадийного получения безводного фтористого водорода [1-5].

Альтернативным методом является прямая реконверсия ОГФУ в воздушной плазме с дополнительным вводом водорода:



Из реакций 1-3 видно, что для воздушно-плазменной реконверсии ОГФУ до диоксида урана необходимо стехиометрическое мольное соотношение в исходной смеси $UF_6:H_2=1:3$. Однако авторы работы [4] указывают, что при проведении воздушно-плазменной реконверсии ОГФУ до диоксида урана мольное соотношение $UF_6:H_2 = 1:3$ приводит к формированию оксифторидов урана ($U_xO_yF_z$) и рекомендуют соотношение $UF_6:H_2 = 1:(4\div 6)$.

Методы исследования. Одним из основных параметров горения таких смесей является температура горения [6,7]:

$$T_{см} = \frac{Q_{н}^{см} + \alpha \cdot m_{ок} \cdot c_{ок} \cdot t_{ок}}{V_{пр} \cdot c_{пр}}, \text{ К}$$

где $Q_n^{см} = Q_n \cdot \frac{\varphi}{100}$ – низшая теплота сгорания исходной смеси, (МДж/кг); φ – содержание горючего компонента в исходной смеси (% масс.); α – коэффициент избытка окислителя (воздух); $m_{ок}$ – масса теоретически необходимого окислителя (кг); $c_{ок}$ – удельная теплоемкость окислителя (кДж/кг·град); $t_{ок}$ – исходная температура окислителя (К); $V_{пр}$ – объем продуктов горения (m^3); $c_{пр}$ – удельная теплоемкость продуктов горения (кДж/ m^3 ·град).

Расчет удельного объема и удельной теплоемкости продуктов воздушно-плазменной реконверсии ОГФУ проводился с помощью программного пакета «TERRA». Результаты расчетов параметров продуктов воздушно-плазменной реконверсии ОГФУ с мольным соотношением в исходной смеси $UF_6:H_2=1:4$ и различной массовой доле воздуха представлены в таблице 1.

Таблица 1

Термодинамические параметры продуктов воздушно-плазменной реконверсии ОГФУ

Масс. доля ОГФУ	Масс. доля H_2	Теплота сгорания смеси ОГФУ+ H_2 , МДж/кг	Масс. доля воздуха	Коэфф. избытка воздуха	Уд. объем продуктов $m^3/кг$	Уд. теплоемкость продуктов, кДж/ $m^3 \cdot K$	Температура горения смеси, К
0,66	0,01	2,75	0,33	1,15	2,79	0,97	1142
0,65	0,01		0,34	1,20	2,74	0,93	1145
0,62	0,01		0,37	1,39	2,74	0,93	1154
0,58	0,01		0,41	1,62	2,83	1,29	814

Из таблицы 1 видно, что изменение массовой доли воздуха в рамках одной композиции не оказывает сильного влияния на термодинамические параметры продуктов воздушно-плазменной реконверсии ОГФУ (удельный объем, удельная теплоемкость, температура горения).

Для определения оптимальных режимов процесса воздушно-плазменной реконверсии ОГФУ были проведены расчеты равновесных составов газообразных и твердофазных продуктов в воздушной плазме при различной массовой доле воздуха. Расчеты проводились при атмосферном давлении 0,1 МПа в диапазоне температур 1000-2000 К и различной массовой доле воздушного плазменного теплоносителя.

На рисунке 1 и 2 представлены газообразные и конденсированные продукты воздушно-плазменной реконверсии ОГФУ при массовой доле воздуха 34, 37 и 41 %масс.

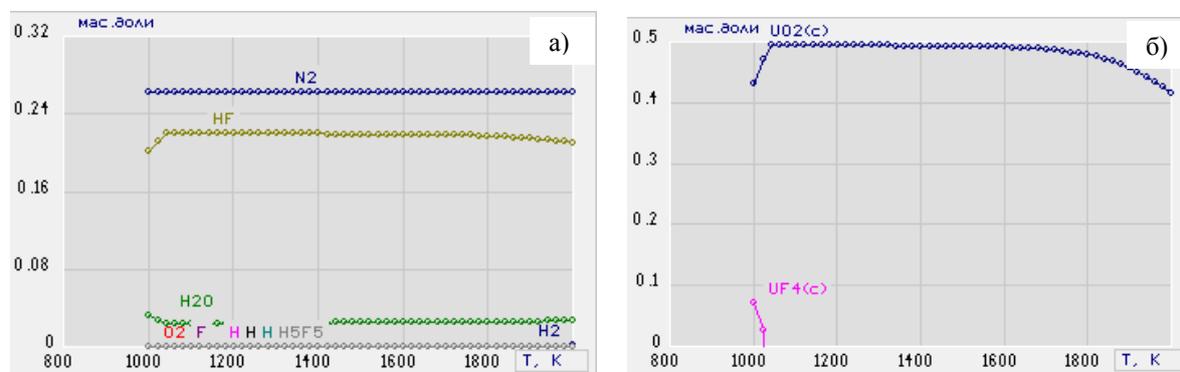


Рис.1. Газообразные (а) и конденсированные (б) продукты плазменной реконверсии ОГФУ при массовой доле воздуха 34 %

Из рисунка 1 следует, что реконверсия ОГФУ с добавлением водорода в воздушной плазме до получения целевого продукта в виде диоксида урана происходит с минимальным образованием газообразных урансодержащих продуктов при массовой доле воздуха, близкой к расчетной (~34 %масс.).

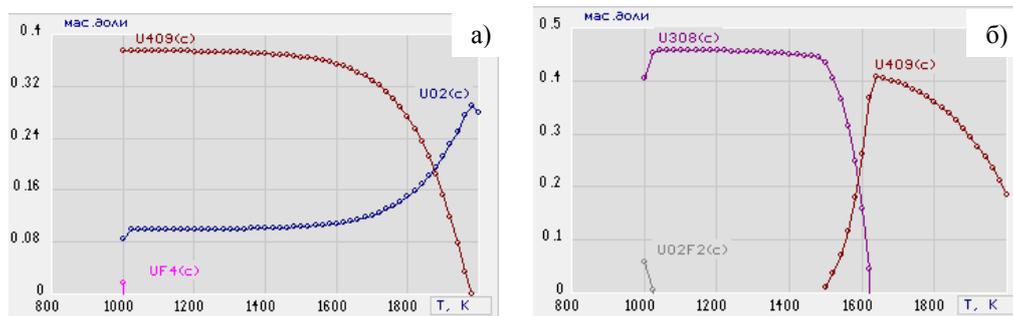


Рисунок 2 – Конденсированные продукты плазменной реконверсии ОГФУ при массовой доле воздуха 37 % (а) и 41 % (б)

Повышение массовой доли воздуха до 37 %масс. (рис. 2а) и 41 %масс. (рис. 2б) не изменяет состав продуктов в газовой фазе, но приводит к существенному изменению состава продуктов в конденсированных фазах с получением нецелевых продуктов в виде U_3O_8 и U_4O_9 .

Выводы. На основании проведенных расчетов и их анализа можно сделать вывод, что воздушно-плазменная реконверсия ОГФУ до диоксида урана является возможным и потенциально эффективным методом решения проблемы накопления и переработки ОГФУ.

На основании полученных результатов, для практической апробации может быть рекомендованы следующие условия для воздушно-плазменной реконверсии ОГФУ до диоксида урана:

- 1) мольное соотношение в исходной смеси: $UF_6:H_2 = 1:4$;
- 2) массовое отношение фаз: $UF_6 - 64,8 \%$ масс., $H_2 - 1,5 \%$ масс., Воздух – 33,7 % масс;
- 3) диапазон рабочих температур: $1400 \div 1500$ К;
- 4) удельные энергозатраты: 0,76 МДж/кг ОГФУ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Management of depleted uranium. – Nuclear energy agency, 2001. – 59 с.
2. Summary of the cost analysis report for the long-term management of depleted UF_6 . – U.S. Department of energy, 1998.
3. Larry G. Davis, John Wang. Integrated solution for long-term management of depleted uranium hexafluoride. – The new fuel cycle, Texas, 1999.
4. Туманов Ю.Н. Плазменные и высокочастотные процессы получения и обработки материалов в ядерном топливном цикле: настоящее и будущее. – М.: Физматлит, 2003. – 760 с.
5. Фэгер Андре. Способ и установка для непосредственного превращения гексафторида урана в оксид урана. Патент FR 2162058 C01G43/025.
6. Архипов В.А., Синогина Е.С. Горение и взрывы, опасность и анализ последствий.: Учебное пособие. Часть 1. – Томск: ТГПУ, 2007.
7. Бернадинер М.Н., Шурыгин А.П. Огневая переработка и обезвреживание промышленных отходов. – М.: Химия, 1990. – 304 с.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРРАСОВИДНОГО РЕЛЬЕФА НА ПОВЕРХНОСТИ СТенок ПОР В
БИОСОВМЕСТИМОМ ПОРИСТОМ НИКЕЛИДЕ ТИТАНА, ПОЛУЧЕННОМ СПЕКАНИЕМ**

С.Г. Анিকেев, Н.В. Артюхова, А.С. Гарин

Научный руководитель: профессор, д.т.н. В.Э. Гюнтер
Национальный исследовательский Томский университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050
E-mail: Anikeev_Sergey@mail.ru

**INVESTIGATION OF TERRACE-LIKE TOPOGRAPHY ON A SURFACE OF PORE WALLS IN
BIOCOMPATIBLE POROUS TINI-BASED MATERIAL OBTAINED BY SINTERING**

S.G. Anikeev, N.V. Artyukhova, A.S. Garin

Scientific Supervisor: Prof., Dr. V.E. Gunther
Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050
E-mail: Anikeev_Sergey@mail.ru

***Abstract.** The results of the investigation of a terrace-like topography on the surface of the pore walls in biocompatible porous permeable TiNi-based material, obtained by sintering are presented in the paper. For this, samples of a porous TiNi alloy were obtained by single and double sintering at various temperature-time regimes. Structural studies of TiNi-based powder obtained by method of calcium hydride reduction are presented. The powder is the starting material for the production of porous samples. It is established that the powder has a double morphology - spongy and compact. On the surface of the spongy particles, weakly expressed elements of the terrace-like topography were found. The presence of a developed rough terrace-like structure was revealed in the study of samples obtained by various methods of sintering. An increase of the sintering temperature activates mechanisms of surface and bulk diffusion, which positively affects the development of the terrace-like topography. However, the high sintering temperatures lead to an increase in volumetric shrinkage and to the growth of particles of secondary phases enriched in titanium Ti₄Ni₂ (O, N, C).*

Введение. Применение пористых имплантатов на основе никелида титана (TiNi) позволяет успешно решать сложнейшие задачи в травматологии, онкологии и челюстно-лицевой хирургии [1]. Методами порошковой металлургии изготавливают пористые материалы на основе никелида титана – метод спекания в электровакуумной печи, самораспространяющийся высокотемпературный синтез, электроимпульсное плазменное спекание, селективное лазерное спекание [2].

Способ получения пористого материала оказывает влияние на его структурные и физико-механические свойства. Для получения качественного пористого материала на основе никелида титана медицинского назначения с минимальным содержанием вторичных фаз целесообразно использовать метод спекания порошка никелида титана, полученного методом гидридно-кальциевого восстановления. Только методом спекания удастся создать условия для активации процессов поверхностного и объемного массопереносов с целью создания шероховатой террасовидной поверхности стенок пор в пористо-проницаемых материалах на основе TiNi.

Величина шероховатости и свойства поверхности стенок пор определяют интеграционные процессы клеточных культур с имплантатом. Биологические клетки более активно прикрепляются к развитой шероховатой поверхности стенок пор, чем к гладкой. Повысить динамику интеграции имплантируемых материалов на основе TiNi в организм человека пытаются многие исследователи, но данные работы проводятся в основном для монолитных материалов.

Целью данной работы является исследование террасовидных структур на поверхности стенок пор пористого материала на основе никелида титана. Для этого будут изучены морфологические особенности исходного порошка TiNi и пористо-проницаемых материалов, полученных при различных типах спекания (однократное, двукратное) и температурно-временных условиях.

Материалы и методы исследования. Образцы пористого сплава никелида титана получены методом двукратного и однократного спекания порошка TiNi марки ПВ–Н55Т45 (ГОСТ (ТУ) 14-22-123-99, ПАО «Тулачермет») при различных температурных и временных режимах спекания. Двукратное спекание проводили в два этапа – первое спекание производится для придания необходимой формы образца в графитовой формовке при температуре 1200 °С и времени спекания 40 мин. Второе спекание проводили на молибденовой подложке в интервале температур 1220–1260°С при времени спекания 40 мин. Методом однократного спекания в кварцевых трубках получены образцы при температурах в интервале 1220–1270 °С и времени спекания 15 мин.

Структуру поверхности частиц порошка и стенок пор полученных образцов исследовали методами растровой электронной микроскопии на системе с электронным и сфокусированным ионным пучками Quanta 200 3D при ускоряющих напряжениях от 20–30 кВ. Концентрационный состав фаз определяли с помощью энергодисперсионного (EDX) микроанализатора EDAX ECON IV. Рентгеноструктурные исследования (XRD) проводили на дифрактометре Shimadzu XRD 6000. Анализ фазового состава проведен с использованием баз данных PDF 4+, а также программы полнопрофильного анализа POWDER CELL 2.4.

Результаты и их обсуждение. Установлено, что порошок никелида титана, полученный методом гидридно-кальциевого восстановления, имеет двойную морфологию – компактную и губчатую. Губчатое строение частиц порошка формируется в процессе восстановительной реакции диоксида титана с кальцием. В губчатых частицах отмечается преимущественное содержание фазы TiNi в виде единого конгломерата мелких зерен размером 10–20 мкм. Компактные частицы порошка состоят из округлых зерен никелида титана, которые окружены прослойкой на основе фазы Ti₂Ni. Методами XRD и EDX установлено наличие фаз TiNi₃, Ti₃Ni₄ в объеме зерен TiNi. На поверхности частиц порошка и по границам зерен обнаружены множественные частицы, обогащенные по титану Ti₂Ni и Ti₄Ni₂(O,N,C). В частицах порошка обнаружены разные структурные состояния мартенситной фазы B19'. В компактных частицах мартенсит B19' в пределах одного массивного зерна имеет вид ортогональных пластин двойников. В губчатых частицах наблюдаются множественные кристаллы мартенсита B19' с пакетно-пирамидальной морфологией, которые заполняют полный объем зерна. В некоторых местах кристаллы мартенсита граничат с поверхностью частиц порошка. На поверхности губчатых частиц порошка зафиксировано наличие слабовыраженного террасовидного рельефа (рис. 1, а). Высота ступеней не превышает 20 нм, что связано с недостаточными температурами для активизации процессов поверхностной и объемной диффузии.

В полученных образцах методами однократного и двукратного спекания во всех местах свободных от частиц вторичных фаз, обогащенных титаном типа $Ti_4Ni_2(O,N,C)$, обнаружен террасовидный рельеф на поверхности стенок пор (рис. 1, б). В порошковой системе во время спекания последовательно реализуются несколько механизмов массопереноса – поверхностной и объемной диффузии. Механизм массопереноса, обусловленный поверхностной диффузией на частицах порошка $TiNi$, значительно превышает вклад от объемной диффузии. Ее вклад на десять порядков больше чем диффузия внутри зерен и на восемь порядков больше чем по границам зерен [3]. Следуя модели «террас–ступеней–изломов» (ТСИ, англ. «TLK»), образование рельефа идет посредством присоединения адатомов к поверхностям излома, которые находятся на поверхности любого кристалла. Появление данного рельефа диктуется процессами поверхностной диффузии адатомов, объемной диффузии атомов и их взаимодействием с дефектами подложки при кристаллизации расплава. С увеличением температуры спекания высота ступеней террас увеличивается до 50–250 нм, ширина ступеней 400–500 нм. Формирование террас начинается от островка гексагональной формы диаметром 1,2–1,3 мкм, однако в некоторых случаях обнаружить его не удастся.

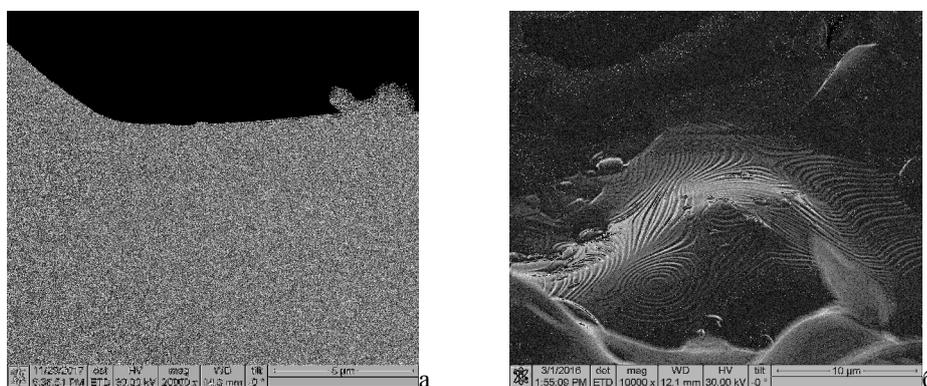


Рис. 1. Террасовидный рельеф на поверхности частицы порошка (а) и поверхности стенки поры в образце, полученном методом спекания (б)

Заключение. В результате проведенных исследований установлено наличие слабовыраженных элементов террасовидного рельефа на поверхности губчатых частиц порошка и развитого террасовидного рельефа на поверхности стенок пор образцов пористого никелида титана, полученного методом однократного и двукратного спекания при различных температурно-временных режимах получения. С увеличением температуры спекания происходит рост террасовидных структур на поверхности стенок пор. Однако спекание при избыточно высоких температурах приводит к объемной усадке, и сопровождается ростом частиц типа $Ti_4Ni_2(O,N,C)$, что ограничивает площадь для образования террасовидных структур на поверхности пористо-проницаемого сплава на основе никелида титана

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №17-79-10123).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Gunther V., Kim Ji-soon. Shape Memory Biomaterials and Implants in Medicine. – 2017. – 496 с.
2. Anikeev S.G., Hodorenko V. N., Chekalkin T. L., Gunther V. E. et al. Fabrication and Study of Double Sintered TiNi-Based Porous Alloys Smart Materials and Structures // Smart Materials and Structures. – 2017. – Vol. 26, № 5. – P. 1–9.
3. Дроздов И. А. Структурообразование никелида титана в процессах порошковой металлургии: дис. ... д-ра физ.-мат. наук. – Самара, 1998. – 190 с.

**ПРОГНОСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ
ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО ИСПАРЕНИЯ КАПЕЛЬ ВОДЫ**

Д.В. Антонов, П.А. Стрижак

Научный руководитель: доцент, д.ф.-м.н. П.А. Стрижак

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: antonovdv132@gmail.com

**PREDICATIVE MODEL FOR INVESTIGATION HIGH-TEMPERATURE EVAPORATION
PROCESSES OF WATER DROPLETS**

D.V. Antonov, P.A. Strizhak

Scientific Supervisor: Senior lecturer, Dr. P.A. Strizhak

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: antonovdv132@gmail.com

***Abstract.** A predicative model has been developed to study the processes of high-temperature heating and evaporation of water droplets, taking into account the main interconnected processes of heat transfer and phase transformations. Typical profiles of temperature and velocity in the system "high-temperature gases - a droplet of water" are established when the temperature of the external gas medium varies from 100 to 800 °C. Various statements of the problem are considered, which differ substantially in the type of processes and factors taken into account. The analysis of temperature regimes of heating and evaporation of water droplets is carried out, at which simplified models can be used, and in which all complex interrelated processes of heat and mass transfer (including convective, conductive and radiant heat transfer in droplets, and also in the near-surface vapor-gas layer) need to be taken into account.*

Введение. В настоящее время широкое применение получили газопарокапельные технологии [1-4], в которых в качестве исходных жидкостей применяются вода, эмульсии, суспензии и растворы на ее основе. Основной задачей при изучении процессов тепломассопереноса в двухфазных и гетерогенных системах является интенсификация процессов испарения и прогрева капельных потоков. Результаты исследований в области интенсифицированного теплообмена находят свое применение при разработке и усовершенствовании технологий эффективных энергоносителей [5], пожаротушения капельными потоками (в том числе неоднородными) с контролируемыми параметрами [6] и термической очистки воды [7].

В последние годы формируется обширная база фундаментальных экспериментальных [8] и теоретических [9] данных о процессах тепломассопереноса при испарении капель воды. Сравнение основных заключений, приведенных в указанных исследованиях, позволяет сделать вывод о существенных различиях между результатами экспериментов и моделирования. Текущее состояние проблемы обусловлено сложностями, возникающими при моделировании высокотемпературного нагрева и испарения капель жидкостей. Целесообразным является создание совершенных моделей, учитывающих сложные взаимосвязанные физико-химические процессы, с целью обеспечения

удовлетворительной корреляции результатов математического моделирования и экспериментальных исследований. Результаты последних будут способствовать детальному изучению моделируемых высокотемпературных процессов. Из анализа современных представлений о таких процессах [10] можно сделать вывод о том, что учесть весь комплекс взаимосвязанных процессов чрезвычайно сложно. Поэтому в первом приближении целесообразно разработать упрощенную модель.

Цель настоящей работы – разработка упрощенной модели теплопереноса при испарении капель воды, учитывающей конвекцию, кондукцию и тепловое излучение.

Математическая модель и методы решения. Постановка рассматриваемой задачи, т.е. испарение капли воды при учете конвективного, кондуктивного и радиационного теплообмена предполагала следующее: однородная сферическая капля воды находится в потоке разогретого до температур T_g газа, который движется со скоростью V_g (рис. 1). Испарение воды происходит со свободной поверхности капли. В результате вокруг неё формируется слой пара толщиной $h_v=R_2-R_1$ (рис. 1). Первый этап решения задачи тепломассопереноса при испарении капли воды включает построение геометрии и сетки с помощью Ansys Design Modeler и встроенного сеточного генератора Ansys Meshing на базе платформы Workbench. При решении поставленной задачи использовались следующие параметры: временной шаг $\Delta t=0,1$ с и координатные шаги $\Delta x=\Delta y=0,05$ мм. Для повышения точности расчетов вблизи границ фазового перехода проводилось сгущение координатной сетки до $\Delta x=\Delta y=\Delta r=0,001$ мм. В качестве допущения при постановке задачи принималось, что теплофизические характеристики в системе «высокотемпературные газы – капля воды» не зависят от температуры. При формулировании физической и математической моделей были учтены конвективный, кондуктивный и радиационный механизмы теплопереноса при обтекании капли воды потоком высокотемпературных газов (рис. 1).

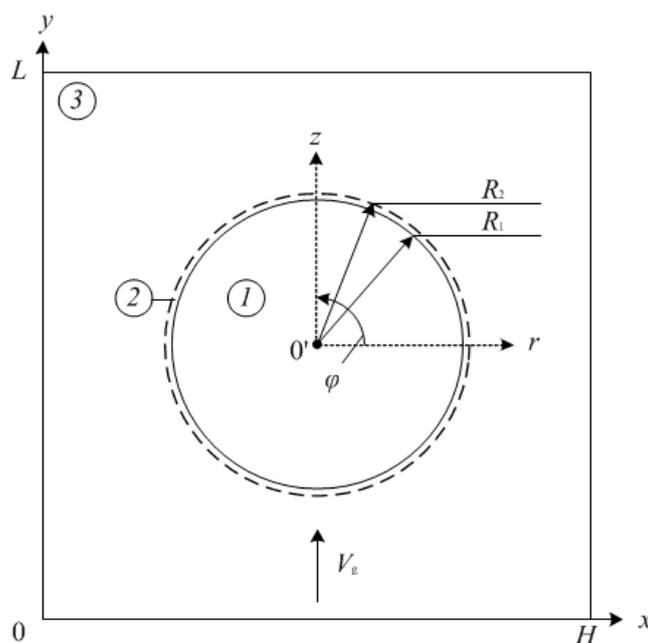


Рис. 1. Схема области решения: 1 – капля воды; 2 – водяной пар; 3 – высокотемпературные газы

Разработанная математическая модель учитывает результаты экспериментальных исследований об основных особенностях и механизмах испарения капель воды в высокотемпературных газах [8]. Важно

отметить, что разработанная модель позволяет варьировать в широком диапазоне большую группу параметров: температура газовой среды, размеры капель, теплофизические свойства воды и другие.

Заключение. Выполненные исследования иллюстрируют важность учета конвективных течений в каплях воды при прогнозировании характеристик их прогрева и испарения. Полученные зависимости можно использовать для развития перспективных газопарокапельных технологий в области создания энергоносителей на основе дымовых газов, паров и капель воды, пожаротушения полидисперсными или неоднородными капельными потоками, термической очистки жидкостей и др. Кроме того, установленные закономерности целесообразно учитывать при проектировании и модернизации технологического оборудования в целях интенсификации теплообменных процессов.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации (МД–1221.2017.8).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Sazhin S.S. and etc. Transient heating of diesel fuel droplets // International Journal of Heat and Mass Transfer. 2004. Vol. 47. No. 14–16. P. 3327–3340.
2. Sawant P. and etc. Prediction of amount of entrained droplets in vertical annular two-phase flow. International Journal of Heat and Fluid Flow. 2009. Vol. 30, No. 4. Pp. 715–728.
3. Zeng Y. and etc. A preferential vaporization model for multicomponent droplets and sprays. Atomization Sprays. 2002. Vol. 12. Pp. 163–186.
4. Antonov D.V., Kuznetsov G.V., Strizhak P.A. Determination of Temperature and Concentration of a Vapor–Gas Mixture in a Wake of Water Droplets Moving through Combustion Products // Journal of Engineering Thermophysics. 2016. V. 25, No 3. P. 337–351.
5. Volkov R.S. and etc. Experimental study of the change in the mass of water droplets in their motion through high-temperature combustion products // Journal of Engineering Physics and Thermophysics, 2013. V. 86, № 6. P. 1413–1418.
6. Voytkov I.S., Volkov R.S., Strizhak P.A. Reducing the flue gases temperature by individual droplets, aerosol, and large water batches // Experimental Thermal and Fluid Science. 2017. V. 88. P. 301–316.
7. Volkov R.S., Strizhak P.A. Planar laser-induced fluorescence diagnostics of water droplets heating and evaporation at high-temperature // Applied Thermal Engineering. 2017. V. 127. P. 141–156.
8. Vysokomornaya O.V., Kuznetsov G.V., Strizhak P.A. Predictive determination of the integral characteristics of evaporation of water droplets in gas media with a varying temperature // Journal of Engineering Physics and Thermophysics. 2017. V. 90, No 3. P. 615–624.
9. S. Sazhin, Modelling of fuel droplet heating and evaporation: Recent results and unsolved problems, Fuel, 196 (2017) 69–101.
10. D.B. Some fundamentals of combustion, London: Butterworth's, 1955.

**СТРУКТУРА ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ КАРБОНИТРИДОВ НА ПОВЕРХНОСТИ
ПОРИСТОГО БИОСОВМЕСТИМОГО НИКЕЛИДА ТИТАНА, ПОЛУЧЕННОГО МЕТОДОМ
СВС**

А.А. Арямкин, Н.В. Артюхова

Научный руководитель: к.ф.-м.н., Ю.Ф. Ясенчук

Национальный исследовательский Томский государственный университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050

E-mail: gearbox.v360@gmail.ru

**THE STRUCTURE OF INTERMETALLIC CARBONITRIDES ON THE SURFACE OF POROUS
BIOCOMPATIBLE TITANIUM NICKELIDE OBTAINED BY THE SHS METHOD**

A.A. Aryamkin, N.V. Artyukhova

Scientific Supervisor: PhD. Yu.F. Yasenчук

Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050

E-mail: gearbox.v360@gmail.ru

***Abstract.** The surface layers and fracture surfaces of porous titanium nickelide obtained by self-propagating high temperature synthesis (SHS) in a flow reactor in an argon atmosphere are studied by SEM and energy dispersive analysis. It is alleged that primary pores 5–15 μ in size and the related granular layer are formed due to segregation and capillary force effect during peritectic crystallization of some porous alloy areas. Carbon and oxygen impurities present in the reaction gases and the protective atmosphere penetrate into the melt film on the pore surface to form strong and corrosion-resistant nanostructured layers of intermetallic carbides, nitrides and oxides.*

Введение. Работа посвящена исследованию поверхностного слоя пористого никелида титана, полученного самораспространяющимся высокотемпературным синтезом (СВС) в атмосфере проточного аргона под влиянием реакционных газов. В работах проводившихся ранее этому аспекту уделялось недостаточное внимание [1-3]. Утверждается, что первичные поры размером 5–15 мкм и связанный с ними зернистый слой образуются благодаря ликвации и действию капиллярных сил в ходе перитектической кристаллизации некоторых участков пористого сплава. Дальнейшее формоизменение и миграция пор связаны с действием реакционных газов. На поверхности пористого никелида титана обнаружены нанокристаллические интерметаллические оксикарбонитриды, имеющие сложную структуру, существование которых обусловлено наличием примесей кислорода, азота и углерода в защитных инертных и реакционных газах [4].

Материалы и методы исследования. В данной работе с помощью Philips SEM 515 и микроанализатора EDAX ECON IV исследованы поверхностные слои и поверхности разрушения пористого никелида титана.

Образцы для исследования были приготовлены из порошков титана восстановленного ПТОМ-2 и никеля карбонильного ПНК-ОТ4. Содержание примесей в порошках титана и никеля соответствует техническим условиям. СВС проводили в защитной газовой среде аргона, который, фильтруясь через

шихту и продукты реакции под небольшим избыточным давлением 0,01–0,05 МПа, вытеснял атмосферный воздух, таким образом, защищая шихту и продукт реакции от окисления.

Исследование поверхностей разрушения проводили на гранулах, полученных дезинтеграцией пористого никелида титана. Дезинтеграция сводилась к разрушению наиболее крупных межпоровых перегородок. При разрушении перегородок вскрылось множество тупиковых и закрытых пор с размерами от 5 до 100 мкм.

Результаты. Все исследованные поры были разделены на четыре типа: 1 – тупиковые многоугольные поры с поперечным сечением 5–15 мкм; 2 – тупиковые сглаженные поры в виде каналов с поперечным сечением 20–100 мкм имеют выход в поры 3-го типа – открытые сглаженные макропоры в виде каналов с поперечным сечением 200–500 мкм и более; 4 – закрытые сферические поры 5–50 мкм (рис. 1). Причиной возникновения многоугольных пор является недостаток питающего расплава на участках перитектической кристаллизации. Дефицит расплава благодаря действию капиллярных сил приводит к образованию зазоров между вязкими округлыми зернами TiNi. В результате, в скоплениях округлых зерен образуются многоугольные поры размером 5–15 мкм, часть которых являются закрытыми, а часть тупиковыми. Избыточное давление реакционных газов вызывает рост подвижных закрытых микропор от 5 до 50 мкм и придает им сферическую форму.

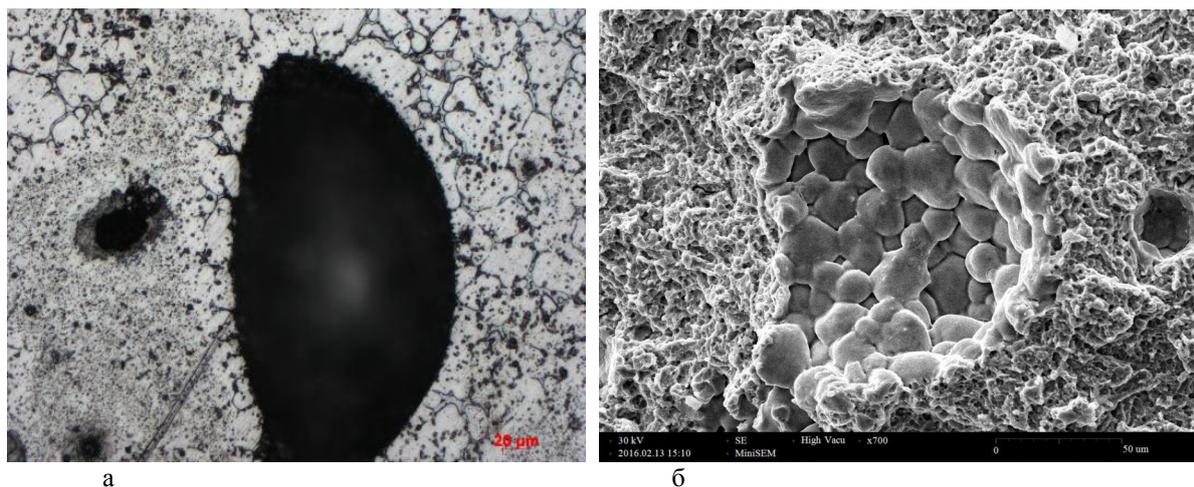


Рис. 1. Зернистые зоны СВС-никелида титана близу макропор: а – оптическая микроскопия шлифа; б – SEM, поверхность вязкого транскристаллитного разрыва, включая зернистые слои закрытых сферических пор

В разрушении межпоровых перегородок следует особенно отметить разрушение поверхностного слоя, которое носит хрупкий характер в отличие вязкого разрушения основного массива перегородки (рис. 2, а).

В эксперименте обнаружено, что задержка пористого сплава в твердожидком состоянии на стадии кристаллизации на доли секунды приводит к существенному развитию процесса слияния пор и усилению процессов дендритной микросегрегации. Причиной этого является перенос тепла проточными газами из реакционной зоны в зону структурирования.

При СВС пористого никелида титана агентами теплопереноса являются и расплав, и газы, оказывая взаимное влияние (рис. 2, б). Проточные реакционные газы, покидая реакционную зону,

захватывают часть расплава с поверхности мелких пор, переносят его в более крупные поры, формируя в них рыхлые наслоения. Состав этого расплава близок к стехиометрии интерметаллида Ti_2Ni .

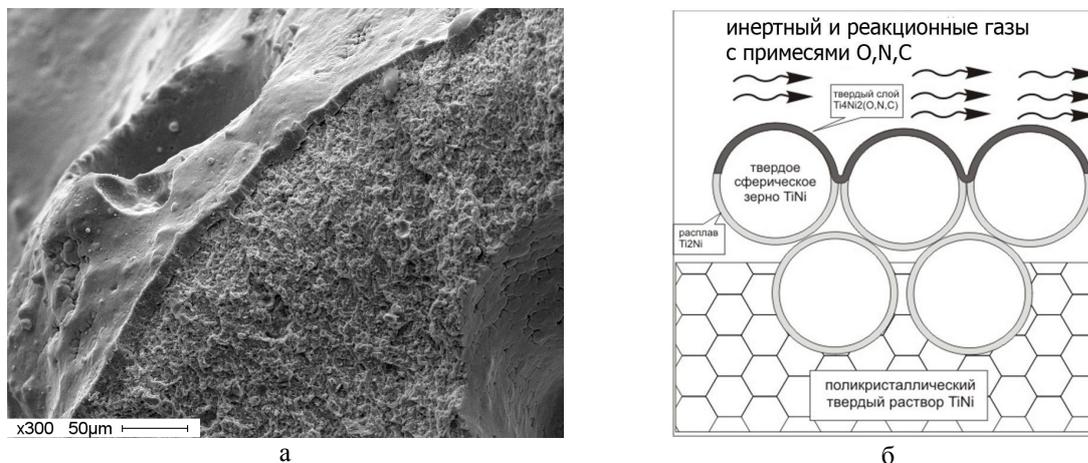


Рис. 2. Поверхностный слой, упрочненный примесями внедрения:

а – внешний вид скола; б – схема формирования

В процессе захвата расплав насыщается примесями кислорода, азота, углерода и водорода, в результате закристаллизовавшиеся наслоения представляют собой интерметаллические оксикарбонитриды.

Выводы. Причиной возникновения пор и связанного с ними зернистого слоя является ликвация в зонах перитектической кристаллизации сплава, образование и сохранение расплава между зернами. Избыточное давление реакционных газов в закрытых микропорах способствует их росту и слиянию в макропоры. Реакционные газы, содержащие примеси углерода, азота и водорода, захватывая часть расплава фазы Ti_2Ni в мелких порах, переносят его в крупные поры, создавая на их поверхности прочные и коррозионностойкие слои интерметаллических оксикарбонитридов, которые обеспечивают требуемую биохимическую совместимость пористому никелиду титана с живыми тканями организмов [5].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Итин В. И., Найбороденко Ю. С. Высокотемпературный синтез интерметаллических соединений. – Томск: Изд-во Том. ун-та, 1989. – 214 с.
2. Итин В.И., Братчиков А.Д., Доронин В.Н. и др. Формирование продуктов самораспространяющегося высокотемпературного синтеза в системах Ti-Ni и Ti-Co // Изв. вузов. Физика. – 1981. – № 12. – С. 75–78.
3. Касымов М.К., Колобов Ю.Р., Итин В.И. и др. Структура и механические свойства никелида титана, полученного синтезом в режиме горения // Изв. вузов. Физика. – 1986. – № 12. – С. 49–54.
4. Merzhanov A. G., Rogachev A. S. Structural macrokinetics of SHS processes / Pure & Appl. Chem. – 1992. – Vol. 64. – No. 7. – pp. 941–953.
5. Gunther V.E., Dambaev G.Ts., Sysoliatin P.G. Delay Law and New Class of Materials and Implants in Medicine. – MA: STT, Northampton, 2000. – p. 432.

**ОСОБЕННОСТИ ИЗМЕРЕНИЯ ТЕРМОЭДС ЦИРКОНИЕВОГО СПЛАВА
С НАПЫЛЕННЫМ СЛОЕМ НИКЕЛЯ**

А.А. Асхатов, Сюй Шупэн

Научный руководитель: профессор В.В. Ларионов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: askhatov10@mail.ru

**PECULIARITIES OF MEASUREMENT OF ZIRCONIUM THERMO-EMF
WITH NICKEL DEPOSITED LAYER**

A.A. Askhatov, Xu Shupeng

Scientific Supervisor: Prof., Dr. V.V. Larionov

Tomsk Polytechnic University, Russia, Lenin str., 30, 634050

E-mail: askhatov10@mail.ru

Abstract. *We investigated vacuum ion-plasma Ni coatings deposited on zirconium by magnetron sputtering. Coatings form a protective film on the surface of the material and reduce the oxidation of the zirconium alloy. The thermal electromotive force method is used as a method for analyzing the materials obtained. The Au-Ni-Zr metals were experimentally selected to control coatings and alloys by measuring the thermal electromotive force. The inversion of the thermal electromotive force (change of sign depending on the hydrogen concentration) allows the critical accumulation of hydrogen in zirconium to be found. The results have shown that the thermal electromotive force of the Zr1Nb zirconium alloy deposited in the form of a film with a thickness of up to 400-500 nm depends on the properties of the alloy and the concentration of hydrogen. The increase in the thickness of the coating up to 2000 nm does not change the thermal electromotive force and corresponds to the values for pure nickel. This coating in combination with the control of the material obtained is promising for the protection of zirconium alloys against corrosion during operation.*

Введение. Получение материалов, используемых в атомной промышленности, стойких к воздействию водорода является актуальной проблемой [1]. Для исключения различных эффектов деградации свойств циркониевых сплавов, используют, например напыление никелем. Теоретическая часть нашей работы предполагает исследование накопления энергии гамма квантов образцами циркония разной толщины и площади. Исследование таких процессов и разработка контроля за ними различными методами также – актуальная задача. В данном случае мы выбрали экспериментальный метод исследования образцов циркониевого сплава по величине термоэдс. Известно, что на величину термоэдс может влиять большое число факторов. Их оценка позволяет получить полную интерпретацию значений термоэдс для наводороженных материалов. Образцы циркония, содержащие никель были получены путем напыления в диапазоне температур от 150 до 600 градусов Цельсия. Возможно улавливание атомов водорода примесями [2]. Возможен процесс восстановления циркония, обусловленный выбросом водорода из образца. Эти и другие факторы всесторонне влияют на термоэдс.

Материалы и методы. В исследовании плоские образцы были получены из циркониевого сплава Zr1Nb и имели размеры $20 \times 20 \times 0,5$ мм. Образцы вырезали из листа циркония. Поверхность образцов была механически измельчена для удаления поверхностных загрязнений. Поверхностные напряжения удаляются и дефекты устраняются отжигом в вакууме при температуре 580 °C в течение 180 минут. Циркониевый сплав Zr1Nb был покрыт никелем с использованием установки (Rainbow-Spectrum), разработанной в Томском политехническом университете. В качестве подложки использовали образец сплава Zr1Nb размером 0,5 мм и диаметром 20 мм. Использовался вакуумный дуговой испаритель с коаксиальным плазменным фильтром. Перед осаждением никеля образцы подвергались воздействию ионов в аргоновой плазме тлеющего разряда при 1500 В в течение 5 мин. Толщину пленки измеряли с использованием устройства Calotest CAT-S-0000 методом истирания стальным шаром с определенным радиусом. Адгезия покрытия улучшена осаждением подслоя Ni с использованием электрического дугового разряда [3, 4].

Экспериментальная часть. Результаты измерения термоэдс показаны на рис. 1 и 2 для толщины пленки, равной 1,54 мкм в зависимости от концентрации водорода. Характерной особенностью этих зависимостей является изменение знака тепловой электродвижущей силы при увеличении концентрации водорода в сплаве.

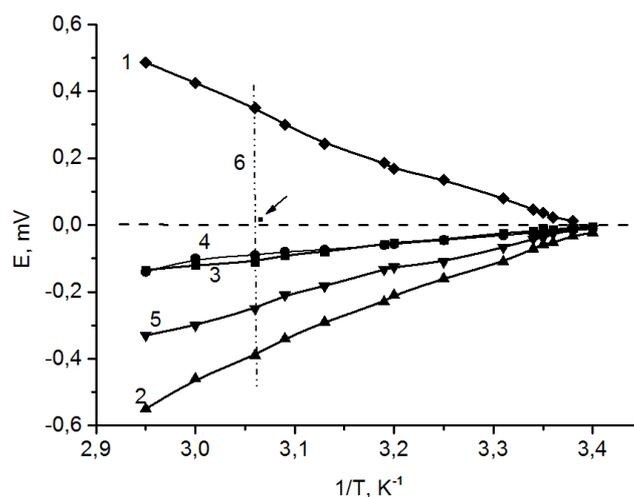


Рис. 1. Зависимость термоэдс от обратной температуры. Стрелка указывает на инверсию знака для термоэдс от концентрации водорода C_H в циркониевом сплаве (1 - $C_H = 2\%$, 2 - $C_H = 1,07\%$, 3 - $C_H = 0\%$, 4 - $C_H = 0,07\%$, 5 - $C_H = 1,5\%$, 6 - изотерма при $t = 60$ °C)

Таким образом, при температуре 60 °C знак электродвижущей силы изменяется (обозначается стрелкой на рисунке 2). Образец, содержащий 2% водорода, подвергается начальной стадии охрупчивания. Обнаружено, что изменение величины термоэдс носит ступенчатый характер и растет с увеличением толщины покрытия. Однако толщина покрытия более чем 400-500 нм не влияет на величину термоэдс. В этом случае она равна значению для собственно циркониевого сплава и определяется только свойствами сплава, концентрацией водорода в сплаве Zr1%Nb. Информационная значимость измерений термоэдс увеличивается, если использовать изотермы при различных температурах. Пример дан на рис. 2. Здесь в полной мере прослеживается изменение знака термоэдс. Этот эффект определяется двумя причинами: выбором материала зонда и концентрацией водорода в

сплаве. Последнее обстоятельство позволяет автоматизировать процессы контроля материала. Т.е. появляется возможность фиксации критического значения водорода в изделии и соответствующего его водородного охрупчивания [1-5].

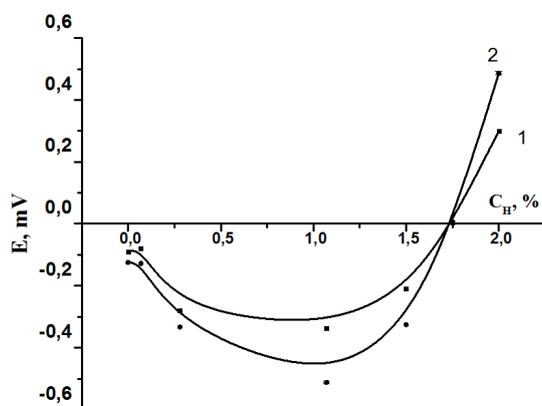


Рис. 2. Изотерма (1 – $t = 50^\circ\text{C}$, 2 – $t = 60^\circ\text{C}$)

Оценка вклада эффектов рассеяния электронов проводимости на дефектах на термоэдс может быть определена по величине теплоемкости наводороженного циркония. Также можно использовать коэффициент электронной теплоемкости $\gamma = 4,1 \cdot 10^{-3}$ Дж / моль / К для $\epsilon - \text{ZrH}_{2,00}$ и закон Видемана – Франца [5]. В докладе приводятся влияние обсуждаемых основных параметров на величину термоэдс.

Выводы. Таким образом, по величине экспериментально измеренной термоэдс можно определить проводимость полученного материала, оценить влияние рассеяния электронов проводимости на дефектах материала циркониевого сплава, включая краевые эффекты, и тем самым оперативно оценивать концентрацию водорода в материале. Отметим также, что площадь петли температурного гистерезиса пропорциональна концентрации водорода. С помощью простого метода измерения термоэдс интерпретирован анализ нового материала в условиях создания покрытия на специализированной установке.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Альфельд Г, Фелькль И. Водород в металлах: в 2-х т., М.: Мир, 1981. Т. 1. – 457 с.: Т. 2. – 430 с.
2. Ларионов В.В., Лисичко Е.В., Лидер А.М. Исследование модификации свойств наводороженных металлов вихретоковым методом // Вестник Челябинского государственного педагогического университета. – 2012. – № 6. – С. 268–276.
3. Lider, A.M., Larionov, V.V., Syrtanov, M.S. Hydrogen concentration measurements at titanium layers by means of thermo-EMF 2016 Key Engineering Materials 683, pp. 199-202.
4. Lider, A., Larionov, V., Kroening, M., Kudiiarov, V. Thermo-Electromotive Force and Electrical Resistivity of Hydrogenated VT1-0 Titanium Alloy 2016 IOP Conference Series: Materials 012004.
5. Akatsu, T., Kato T., Shinoda Y., F. Wakai. Thermal barrier coating made of porous zirconium oxide on a nickel-based single crystal superalloy formed by plasma electrolytic oxidation. Surface and Coating Technology. 2013. V. 223. P. 47-51.

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРСПЕКТИВНЫХ СХЕМ ОБРАБОТКИ ОБРАЗЦОВ ИЗ
ЛИСТОВОГО ПРОКАТА**

Л.Р. Ахметшин, В.А. Красновейкин, Е.Н. Москвичев

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. В.А. Скрипняк

Национальный исследовательский Томский государственный университет

634050, г. Томск, пр. Ленина, 36, Российская Федерация,

E-mail: this_is_patrik@mail.ru

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРСПЕКТИВНЫХ СХЕМ ОБРАБОТКИ ОБРАЗЦОВ ИЗ
ЛИСТОВОГО ПРОКАТА**

L.R. Akhmetshin, V.A. Krasnovykin, E.N. Moskvichev

Scientific Supervisor: Prof., Dr. V.A. Skripnyak

National Research Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050

E-mail: this_is_patrik@mail.ru

***Abstract.** In work with the use of methods of numerical modeling was solved the problem of determining of stress-strain state of specimens from light structural alloys on the basis of aluminum sheet metal during processing intense plastic deformation. For the realization of intensive plastic deformation of flat samples, it is proposed to use the method of pressing the groove. We consider the classical and alternative tooling of the mold. The alternative equipment has teeth in the form of half-cylinders. Changes in physical and mechanical properties due to changes in the internal structure of the treated flat samples are assumed. The advantages of the developed original rig before the classical execution are indicated. The obtained results of the numerical solution coincide with some error and correlate with one cycle of equal-channel angular pressing.*

Введение. Метод прессования рифлением для модификации образцов листового проката из легких конструкционных сплавов, основанный на реализации интенсивных пластических деформаций, зарекомендовал себя как перспективный подход для изменения внутренней структуры материалов и изменения их физико-механических свойств [1-3]. Данный метод является альтернативой таким методам, как угловое прессование и кручение под давлением [4]. Суть метода прессования рифлением и аналитическое решение подробно описаны авторами в [2]. Однако остается актуальным вопрос создания более точных прогностических физико-математических моделей, описывающих процесс обработки этого класса материалов. При этом математическое моделирование является удобным теоретическим инструментом, позволяющим реализовать выявление основных механизмов и закономерностей. Дополнительно, физико-математическая модель позволит оценить величины усилий при прессовании, что поможет избежать ошибок при проектировании пресс-форм и оптимизации режимов обработки.

Основной целью работы являлось выявление методами численного моделирования особенностей обработки плоских заготовок при использовании оснастки для прессования рифлением при модификации структуры листового проката магниевого сплава Ма2-1.

Материалы и методы исследования. В работе определены напряженно-деформированного состояния плоских заготовок из исследуемого сплава при обработке прессованием рифлением проводили методами численного моделирования. Математическая модель для решения поставленной задачи

представлена системой дифференциальных уравнений механики сплошной среды, состоящей из уравнений равновесия, геометрических соотношений, определяющих соотношений. Определяющее соотношение, учитывает упругопластическое поведение материала и основано на билинейной аппроксимации экспериментальной кривой деформирования для исследуемого сплава. Билинейная аппроксимация заключается в замене нелинейной упругопластической задачи двумя линейными упругими задачами. Данный подход является частным случаем метода упругих решений А.А. Ильюшина. Для решения системы уравнений применяли метод конечных элементов в Лагранжевом подходе для плоско-деформированного состояния.

Константы определяющего уравнения находили из результатов экспериментов по одноосному растяжению плоских образцов из магниевого сплава Ма2-1 при температурах 293 и 493 К и скорости деформации 0.001 1/с. При квазистатическом нагружении повышение температуры приводит к уменьшению сопротивления сплава и увеличению степеней предельных деформаций. Предполагается, что оснастка пресс-формы на протяжении всего эксперимента ведет себя абсолютно упруго, в качестве материала выбрана закаленная сталь 40Х.

Результаты и обсуждения. Численное моделирование прессования рифлением проводилось для полувала обработки, заключающемся в одном прессовании рифлением и одном выпрямлении плоской заготовки из листового проката толщиной 1,5 мм. За один полуцикл прессования сдвиговые деформации в образце реализуются неравномерно. Накопление эффективной пластической деформации происходит в области сдвига. Численные расчеты показывают, что величина эквивалентной пластической деформации при прессовании рифлением равна ~ 0.71 . Результат расходится с аналитическим решением в среднем на 17 %. Этот эффект объясняется излишней идеализацией аналитического расчета, а именно допущениями об отсутствии трения и равенства нулю всех компонент тензора деформации кроме сдвиговых. На самом деле в образце реализуется сложнапряженное состояние, которое вносит значительный вклад в накопление эффективной пластической деформации.

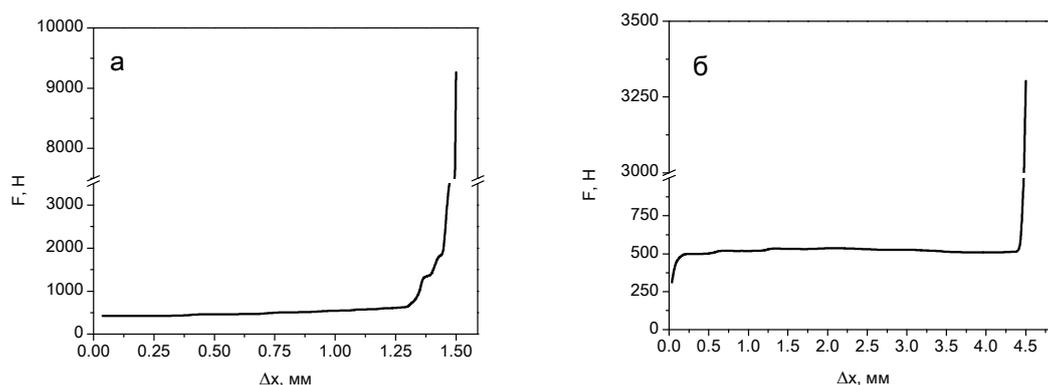


Рис. 1. Реакция опоры при прессовании, а – рифлением, б – выпрямлением

Установлено, что при рифлении в недеформированных местах толщина пластины остается неизменной, а в местах, где локализуются большие пластические деформации, она уменьшается до 0,75 мм. Данное сужение характеризуется тем, что в этой области происходит процесс растяжения. При выпрямлении образца происходит перераспределение материала, тем самым в местах сужения при рифлении остаточная толщина будет равна $\sim 1,38$ мм, а в местах, где деформации невелики $\sim 1,5$ мм.

Оценена величина реактивного усилия F_y при прессовании рифлением равная 9264 Н (рис. 1, а) и при выпрямлении равна 3303 Н (рис. 1, б) для плоской заготовки площадью равной $S_{xz}=24 \text{ мм}^2$ и толщиной 1,5 мм. Как видно на диаграммах (рис. 1) происходит резкое увеличение усилий, это связано с тем, что значительная часть усилия пойдет на поджатие в локальных областях заготовки. Также это может стать причиной образования трещин. При подготовке оснастки ее размеры необходимо выбирать исходя из ширины и длины заготовки и возможностей оборудования для прессования. Соответственно, усилие необходимое для обработки увеличивается пропорционально площади заготовки.

Заключение. На основе результатов численного моделирования была проведена оценка напряженно-деформированного состояния плоских образцов при прессовании рифлением в классической оснастке в билинейной постановке задачи, определены степени накопления пластической деформации при оптимальных режимах прессования. Максимальная величина накопленной пластической деформации по всей длине заготовки за один цикл обработки равна 1,35, что соизмеримо с результатами численного моделирования для магниевых сплавов. Результаты эквивалентны с одним циклом обработки объемных образцов при равноканальном угловом прессовании. Большие степени деформации являются причиной измельчения внутренней структуры материала [5], что приводит к изменению его физико-механических свойств. Увеличение числа циклов прессования ведет к пропорциональному увеличению степени накопленной деформации.

Благодарность. Данное научное исследование выполнено при частичной поддержке Российского научного Фонда (грант № 16-19-10264) и Программы повышения конкурентоспособности ТГУ (проект фонда Д.И. Менделеева ТГУ).

ЛИТЕРАТУРА

1. Москвичев Е.Н., Скрипняк В.А., Лычагин Д.В., Козулин А.А. Формирование текстур сплава 1560 при интенсивной пластической деформации // Вестник Тамбовского университета. Серия: Естественные и технические науки. - 2016. - Т. 21. - № 3. - С. 1180-1183.
2. Москвичев Е.Н., Скрипняк В.А., Скрипняк В.В., Козулин А.А., Лычагин Д.В. Исследование структуры и механических свойств алюминиевого сплава 1560 после интенсивной пластической деформации методом прессования с рифлением // Физическая мезомеханика. - 2017. - Т. 20. - № 4. - С. 85-93.
3. Amit Kumar Gupta, Tejveer Simha Maddukuri, Swadesh Kumar Singh Constrained groove pressing for sheet metal processing // Progress in Materials Science. 84, 2016. pp. 403–462.
4. Маркушев М.В. К вопросу об эффективности некоторых методов интенсивной пластической деформации, предназначенных для получения объемных наноструктурных материалов//Письма о материалах. - 2011. - Т.1. - №1. - С. 36-42.
5. Kozulyan A.A., Skripnyak V.A., Krasnoveikin V.A., Skripnyak V.V., Karavatskii A.K. An investigation of physico-mechanical properties of ultrafine-grained magnesium alloys subjected to severe plastic deformation // Russian Physics Journal, 2015. Т. 57. № 9. С. 1261-1267.

ВЛИЯНИЕ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА ДЕФЕКТНУЮ СТРУКТУРУ Ti-6Al-4V

М.Н. Бабихина, Р.С. Лаптев

Научный руководитель: ассистент В.Н. Кудияров

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: m.babihina@mail.ru

INFLUENCE OF PLASTIC DEFORMATION ON THE DEFECTIVE STRUCTURE OF Ti-6Al-4V

M.N. Babikhina, R.S. Laptev

Scientific Supervisor: assistant V.N. Kudiiarov

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: m.babihina@mail.ru

***Abstract.** The influence of plastic deformation on the defect structure of Ti-6Al-4V titanium alloy was investigated. X-ray analysis was performed with interpretation of the diffractogram reflections and determination of the parameters of the crystal structure. The data obtained were used to calculate the dislocation density of a titanium alloy after cold-rolled plastic deformation.*

Введение. Наличие дефектов в металлах и сплавах оказывает сильное негативное воздействие на их физико-химические и механические свойства. При изучении различного рода дефектов в основном используют теоретические расчеты, которые ограничены только изучением энергии их формирования и не рассматривают такие процессы как кинетика, механизмы формирования и эволюции. При этом для исследования данных явлений и процессов в дефектообразовании существует достаточно ограниченное количество методов. Однако наиболее эффективными и чувствительными методами идентификации разного рода дефектов являются методы позитронной спектроскопии. Данные методы позволяют определять не только тип и концентрацию дефектов, но и их химическое окружение. [1]

Однако, для получения количественной и качественной оценки количества дефектов методами позитронной спектроскопии необходима дополнительная информация о базовых дефектах и их влиянии на характеристики позитронной аннигиляции. В данной работе материалом для исследования был выбран титановый сплав марки ВТ6, так как данный материал нашел своё широкое применение в авиастроении, и изучение процесса формирования разного рода несовершенств кристаллической структуры в данном сплаве до сих пор остается актуальным.

В данной работе для создания преимущественно дислокационных дефектов был использован метод холоднокатаной пластической деформации. Для анализа дефектов применялись методы анализа временного распределения аннигиляции позитронов и совпадений доплеровского уширения аннигиляционной линии. Применяя данные методы, можно будет установить закономерности изменения аннигиляционных характеристик от плотности дислокаций, а также влияние примесей и легирующих элементов [1].

Материалы и методы исследования. В качестве материала использовался титановый сплав марки ВТ6 (Ti-6Al-4V) круглой формы, диаметром 10 мм и высотой 4 мм. Все поверхностные дефекты

(вмятины, грубые царапины и т.д.) были удалены в результате механической обработки поверхности при помощи наждачной бумаги с маркировками по ISO-6344 600, 1500, 2000 и 2500 и полировки с использованием алмазной пасты. Для удаления дефектов прокатки и снятия внутренних микронапряжений производился высокотемпературный вакуумный отжиг при температуре 1000 °С в течение 2-ух часов [2]. Для получения различной степени деформации в исследуемых образцах производилась механическая прокатка с использованием механического стана. Для выявления структуры материала производилось травление в растворах кислот: 92 мл H₂O, 6 мл HNO₃, 2 мл HF [3] и 15 мл HF, 85 мл H₂O [4]. Поверхность является одной из основополагающих деталей при исследовании материала и проведении металлографического анализа, был осуществлен контроль шероховатости на приборе Hommel Tester T1000. Шероховатость исходных образцов составила R_a=0,03 мкм. С помощью металлографического инвертированного микроскоп МЕТАМ ЛВ было проведено исследование поверхности. Рентгеноструктурный анализ проводился с использованием дифрактометра Shimadzu XRD-7000S.

Результаты и их обсуждение. На рисунке 1 представлена микроструктура титанового сплава после высокотемпературного вакуумного отжига.

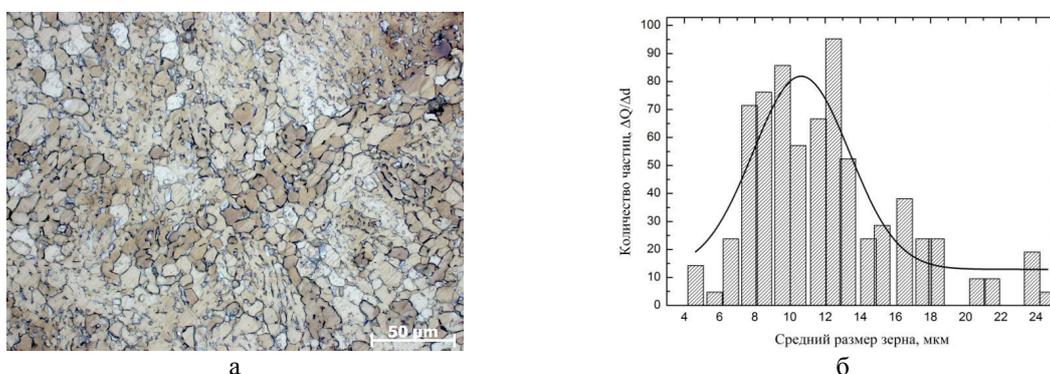


Рис. 1. Микроструктура (а) и гистограмма распределения зерен по размеру (б) титанового сплава ВТ6 после высокотемпературного вакуумного отжига

Микроструктура образцов после отжига (рисунок 1а) представлена неравноственными глобулярными зёрнами. Средний размер составляет от 7 до 14 мкм (рисунок 1б).

Был проведен рентгеноструктурный анализ титанового сплава марки ВТ6 после холоднокатаной пластической деформации. Из представленных данных видно, что происходит некоторое незначительное увеличение интенсивности рефлексов в направлении (002) со степенью деформации 11,9% в отличие от исходного материала после высокотемпературного вакуумного отжига. Следует также отметить, что происходит небольшое смещение положения рефлексов относительно исходного образца после высокотемпературного вакуумного отжига.

Был произведен расчет плотности дислокаций по методике, которая подробно описана в работе [5]. Результаты расчета представлены в таблице 1.

Таблица 1

Результаты расчета ОКР, внутренних упругих напряжений второго рода и плотности дислокаций

Степень деформации, %	ОКР, нм	Внутренние упругие напряжения второго рода	$\rho \cdot 10^{14}, \text{м}^{-2}$
0	116,0	0,00161	0,34
0,8	144,8	0,00363	1,30
2,7	146,1	0,00573	2,54
3	453,5	0,00648	2,85
6,8	92,7	0,00688	3,84
11,9	57,5	0,0113	5,75

Заключение. В настоящей работе было проведено исследование влияния пластической деформации на дефектную структуру Ti-6Al-4V. Было установлено:

- Структура титанового сплава марки ВТ6 после высокотемпературного вакуумного характеризуется неравноосными глобулярными зёрнами;
- После высокотемпературного вакуумного отжига средний размер зёрна варьируется в пределах от 7 до 14 мкм;
- С увеличением степени деформации происходит уменьшение соотношения параметров решетки c/a , что приводит к искажению кристаллической решетки титанового сплава;
- Плотность дислокаций в титановом сплаве со степенью деформации 11,9% в 17 раз выше, чем в образце после высокотемпературного вакуумного отжига.

Также в настоящее время проводится исследование дефектной структуры исследуемого материала методами электрон-позитронной аннигиляции.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лидер А.М. Позитронная спектроскопия для контроля микроструктурных изменений в системах «металл-водород» дисс. док.тех.наук. Томский по-литехнический университет, Томск, 2017
2. Hruska P., Cízek J., Knapp J., Lukac F., Melikhova O., Maskova S., Havela L., Drahokoupil J. Characterization of defects in titanium created by hydrogen charging/P. Hruska, J. Cízek, J. Knapp, F. Lukac, O. Melikhova, S. Maskova, L. Havela, J. Drahokoupil//International Journal of Hydrogen Energy. – 2017.
3. Pederson R. Microstructure and Phase transformation of Ti-6Al-4V: дис. – Luleå tekniska universitet, – 2002.
4. Логачёва А.И. Комплексная технология изготовления тонкостенных элементов методом порошковой металлургии для производства деталей из конструкционных и функциональных сплавов на основе титана и никеля для изделий ракетно-космической техники: дис. д-ра тех.наук. ОАО «КОМПОЗИТ», Королев, 2016.
5. Савицкая Л. К. Методы рентгеноструктурных исследований. Учеб. пособие. – 2003.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФФУЗИИ ВОДОРОДА ПО ГРАНИЦАМ ЗЕРЕН В ТИТАНЕ

К.Б. Байтурсинов

Научный руководитель: ассистент, к.ф.-м.н. Н.В. Чистякова
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050
E-mail: kuat-1994@mail.ru

SIMULATION OF HYDROGEN DIFFUSION ON TITANIUM GRAIN BOUNDARY

K.B. Baitursinov

Scientific Supervisor: assistant, candidate of physical and mathematical sciences N.V. Chistyakova
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050
E-mail: kuat-1994@mail.ru

***Abstract.** In the present study, we calculated the diffusion of hydrogen in titanium. For this purpose, the molecular dynamics method was used in the LAMMPS software package. The results of simulation of hydrogen diffusion in an ideal crystal and with a lattice having defects as grain boundaries are presented.*

Введение. Проникновение и накопление водорода в титановых продуктах в результате значительного изменения их физических, химических и эксплуатационных свойств и разрушения вследствие водородного охрупчивания. Поэтому система титан-водород является предметом интенсивного изучения в настоящее время. В дополнение к экспериментальным методам исследования в физике конденсированных сред широко используются методы компьютерного моделирования.

Метод моделирования. Моделирование проводилось методом молекулярной динамики LAMMPS. LAMMPS - программное обеспечение открытого кода для моделирования методом молекулярной динамики, разработанное в национальных лабораториях Sandia, США [1].

Определение потенциала межмолекулярного взаимодействия является определяющим фактором моделирования молекулярной динамики. Только межатомный потенциал определяет силу, действующую на атомы и, следовательно, как двигаются атомы, а также все параметры кристаллической решетки.

В этой работе мы используем потенциал, развитый в [3]. Потенциальным типом является метод погруженного атома с угловая зависимость потенциала (МПА УЗП).

$$U = \sum_i F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \varphi_{ij}(r_{ij}) + \frac{1}{2} \sum_i (\mu_i^\alpha)^2 + \frac{1}{2} \sum_i (\lambda_i^{\alpha\beta})^2 - \frac{1}{6} \sum_i v_i^2$$

Коэффициенты определяются выражениями:

$$\mu_i^\alpha = \sum_{j \neq i} u_{ij}(r_{ij}) r_{ij}^\alpha, \quad \lambda_i^{\alpha\beta} = \sum_{j \neq i} w_{ij}(r_{ij}) r_{ij}^\alpha r_{ij}^\beta, \quad v_i = \sum_\alpha \lambda_i^{\alpha\alpha}$$

Индексы α, β соответствуют трем направлениям системы координат x, y и z . Вектор μ_i^α и тензор $\lambda_i^{\alpha\beta}$ соответствуют дипольным и квадрупольным моментам и описываются парой дополнительных функций межатомных расстояний $u_{ij}(r_{ij})$ и $w_{ij}(r_{ij})$. Величина v_i является импульсом тензора $\lambda_i^{\alpha\beta}$.

В этой работе мы построили атомную модель идеального кристаллического титана с решеткой ГПУ и кристаллом титана ГПУ, содержащим границу зерен. Граничный тип зерен представляет собой

симметричную границу наклона 5Σ , образующую разориентации двух кристаллитов вдоль оси z до угла $36,6$ градуса (рис. 1). и к ним был помещен один атом водорода. Вычислили энергию и сделали расчеты коэффициента диффузии водорода в ГПУ титана. Визуализация структур проводилась с использованием программы OVITO [2].



Рис. 1. Атом водорода в идеальной решетке ГПУ титана (а) и атом водорода на границе 5Σ зерен в решетке ГПУ титана (b).

Результаты и обсуждение. Во-первых, была определена энергия образования границы зерен 5Σ . Для этой цели была найдена минимальная энергия идеальной кристаллической структуры и минимальная энергия кристалла, содержащего границу зерна с тем же числом атомов в системе, а затем была определена их разность по формуле (1) и энергия поглощения атома водорода в идеальной ГПУ-решетке титана. Так же энергия поглощения атома водорода на границе зерен (3) и результаты были представлены в таблице 1.

$$E_{gb}^{form} = E_{gb} - E_{id} \quad (1)$$

$$E_{H_{id}}^{form} = E_{H_{id}} - E_{id} \quad (2)$$

$$E_{H_{gb}}^{form} = E_{H_{gb}} - E_{gb} \quad (3)$$

Таблица 1

Энергии образования титана

E_{gb}^{form} , eV	$E_{H_{id}}^{form}$, eV	$E_{H_{gb}}^{form}$, eV
47.88	1.25	-13.63

Изучение диффузии. Для определения коэффициента диффузии методом молекулярной динамики вычисляется среднеквадратичное смещение частицы от начальной точки. Среднеквадратичное смещение определяется выражением:

$$\langle \vec{r}^2(t) \rangle = \langle |\vec{r}(t) - \vec{r}(0)|^2 \rangle \quad (4)$$

Там $\vec{r}(t)$ - положение частиц в момент времени t ; $\vec{r}(0)$ - положение частиц в начальной точке.

Усреднение смещения выполняется на всех атомах в системе (или атомах данного типа, если система многокомпонентная).

Из-за уравнения Эйнштейна среднеквадратичное смещение атомов прямо пропорционально времени:

$$\langle \vec{r}^2(t) \rangle = 6Dt \quad (5)$$

Коэффициент пропорциональности D в этой формуле представляет собой коэффициент диффузии. Таким образом, коэффициент диффузии D можно определить на основе зависимости среднеквадратичного смещения атомов (MSD) от времени:

$$D = \frac{\langle r^2(t) \rangle}{6t} \quad (6)$$

Выражение (6) показывает, что для определения коэффициента диффузии при данной температуре необходимо построить график зависимости среднего квадратного смещения от времени. Среднеквадратичное смещение увеличивается с ростом температуры. Эта зависимость линейна. Наклон линейной зависимости определяет коэффициент диффузии D .

На рис. 2 показана зависимость среднеквадратичного смещения образцов при температуре 1000 К. Наклон прямой позволяет определить коэффициент диффузии. Результаты представлены в таблице 2.

Таблица 2

Параметры диффузии

Идеальная решетка	Решетка с границей зерен
$1.6 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$	$1.8 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$

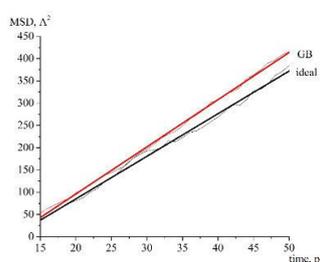


Рис. 2. Зависимость среднеквадратичного смещения атома водорода от времени в идеальной решетке (*ideal*) и в решетке с границей зерен (*GB*)



Рис. 3. Траектории атома водорода в идеальной решетке ГПУ титана (a) и в решетке, содержащей границу зерен (b)

Вывод. В результате расчетов было установлено, что адсорбция атома водорода на границе зерен энергетически намного эффективнее, чем в идеальной решетке. Следовательно, атомы водорода должны накапливаться на границе зерен, что подтверждается расчетами молекулярной динамики (рис. 3). Коэффициент диффузии атома водорода в решетке, содержащей границу зерен, немного больше, чем в идеальной решетке. Из этих результатов можно сделать вывод, что атом водорода часто совершает диффузионные скачки, находясь на границе зерен, поэтому коэффициент диффузии в образце, содержащий границу зерен, выше.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. URL: <http://lammps.sandia.gov/>
2. Open Visualization Tool. URL: <https://ovito.org/>

**ИЗМЕНЕНИЕ СМАЧИВАЮЩИХ СВОЙСТВ МЕТАЛЛОВ ПОСЛЕ ИХ ОБРАБОТКИ
ЛАЗЕРНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ**

К.А. Батищева, А.Г. Исламова

Научный руководитель: доцент, к.т.н. Д.В. Феоктистов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: bka1801@mail.ru

**MODIFICATION OF THE METAL-PRECISION PROPERTIES AFTER THEIR PROCESSING BY
LASER RADIATION**

K.A. Batishcheva, A.G. Islamova

Scientific Supervisor: Associate Professor, Ph.D. D.V. Feoktistov

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: bka1801@mail.ru

***Abstract.** The influence of pulsed laser radiation on the surface texture of an aluminum alloy AMG-6 was experimentally investigated. The diameters of the craters formed in the zone of the beam effect are determined. The dependence of the diameter on the power of the laser beam, the frequency of the pulses and the time of action is established.*

The process of creating a superhydrophobic coating was investigated. The substrate after the texturing is processed by low-temperature annealing in the furnace for 6 hours at a temperature of 100 ° C. The contact angle of the drop of water (θ) increased from 90 degrees (polished substrate) to 175 degrees (textured by pulsed nanosecond radiation and processed by low-temperature annealing).

Введение. Супергидрофобные и супергидрофильные материалы востребованы во всех сферах деятельности человека [1]. Большинство известных способов как улучшающих, так и ухудшающих смачиваемость имеют недостаток – ограниченный срок использования, по истечению которого поверхность приобретает свойства смачиваемости до их изменения. Последнее происходит под влиянием окружающей агрессивной среды, механического износа поверхности. Актуальным является разработка способа изменения поверхностных свойств металлов за счет изменения текстуры поверхности. Одним из способов является обработка лазерным излучением [2].

Цель работы – определение смачивающих свойств алюминиевой поверхности после ее обработки лазерным излучением.

Материалы и методы исследования. Эксперимент проведен на образцах из алюминий-магниевого сплава АМГ-6 (ГОСТ 4784-97), представляющие собой полированные пластины толщиной 5 мм.

Для текстурирования металлической поверхности использовался иттербиевый импульсный волоконный лазер «IPG Photonics», с длиной волны 1064 нм, мощностью до 20 Вт, частотой следования импульсов от 20 до 100 кГц, временем воздействия до 200 нс. Объектив лазера размером 110x110 мм находился на расстоянии 0,25 м от подложки. Перемещался с помощью двухосевого (X, Y) гальваносканера в двух взаимоперпендикулярных направлениях. Сгенерированный луч воздействовал на

полированную поверхность одиночными импульсами. Луч лазера нагревал металл до температуры плавления. Дальнейшее поглощение излучения металлической поверхностью инициировало кипение расплавленного металла. Происходила абляция – металл испарялся с поверхности. Образовывался кратер. Испарившейся металл осаждался вокруг зоны воздействия в виде микро- и нано частиц. Фотоизображения микроструктуры поверхности получены с помощью электронного сканирующего микроскопа «Hitachi-3000M».

Экспериментальные исследования проведены с использованием теневой методики на установке, принцип действия которой, подробно описан в [3].

Результаты. Выбор параметров лазера обусловлен необходимостью определения влияния лазерного излучения на поверхность подложки. Проведен полный факторный эксперимент. Факторы представлены в таблице 1.

Таблица 1

Параметры лазера

Время воздействия	нс	100, 200
Мощность	Вт	8, 12, 20
Частота следования импульсов	кГц	20, 60, 99

Луч лазера с выбранными параметрами (таб. 1) формировал в зоне воздействия кратеры.

По результатам анализа фотоизображений кратеров установлено, что в зоне воздействия лазерного луча с частотой следования импульсов 99 кГц формировались кратеры разных размеров. Отсутствовала повторяемость результатов. Вокруг кратеров, сформированных лазерным излучением мощностью 20 Вт, имелись радиально направленные брызги и струйки металла. Радиус распространения последних превышал размер кратера. Формировалась многомодальная шероховатость. Определена зависимость диаметра от мощности лазера (рис.1).

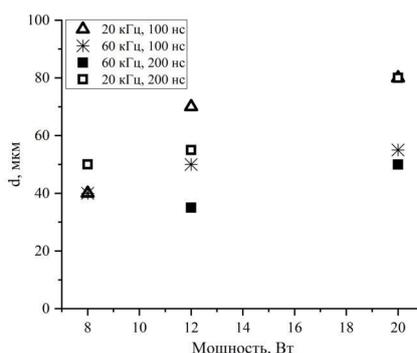


Рис. 1. Зависимости диаметра кратера от мощности

Установлено, что в зоне воздействия лазерного излучения частотой 20 кГц формируются кратеры, диаметр которых увеличивается пропорционально мощности.

Для создания супергидрофобного покрытия выделены следующие параметры лазера: мощность 20 Вт, частота 20 кГц, время воздействия 200 нс, скорость перемещения 2000 мм/с. Фотоизображение микроструктуры представлено на рисунке 2 (масштаб 200:1).

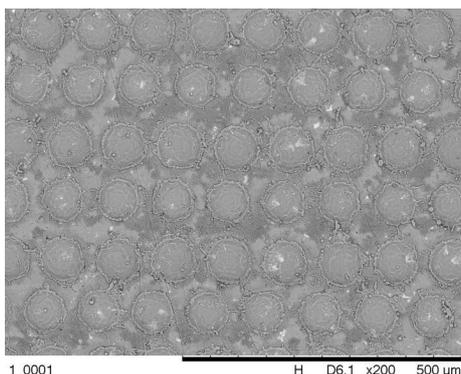


Рис. 2. Фотоизображение микроструктуры

Контактный угол (θ), измеренный на полированной поверхности подложки 90 градусов. После создания текстуры лазерным излучением θ составил менее 10 градусов. Капля растекалась по подложке в ассиметричное пятно. Измерения проводились в первый день и спустя 30 дней после нанесения текстуры. Спустя 30 дней после нанесения текстуры, проведен низкотемпературный отжиг подложки в течении 6 часов при температуре 100 градусов Цельсия. После охлаждения вместе с печью подложка демонстрировала супергидрофобные свойства (θ 175 градусов). Через 7 дней супергидрофобные свойства сохранились. Предполагается, что в результате отжига происходят изменения кристаллической решетки и (или) химического состава поверхностного слоя подложки.

Проведены исследования по изменению смачиваемости полированной алюминиевой подложки после низкотемпературного отжига в течении 6 часов при 100 градусах Цельсия. Установлено, что низкотемпературный отжиг не влияет на свойства смачиваемости без предварительного текстурирования лазерным излучением θ не изменился.

Заключение. На основании анализа и обобщения результатов проведенных экспериментальных исследований установлено, что мощность лазерного излучения влияет на диаметр кратеров при частоте следования импульсов 20 кГц. Установлено, что алюминиевый сплав АМГ-6, текстурированный лазером, демонстрирует гидрофильные свойства. Отжиг в печи после лазерного воздействия формирует супергидрофобную поверхность.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бойнович Л.Б., Емельяненко А.М. // Успехи химии. – 2008. – Т. 77. – С. 619.
2. Drelich J., Chibowski E., D. Desheng Meng D., Terpilowski K., Hydrophilic and Superhydrophilic Surfaces and Materials // Soft Matter. – 2011. Т. 7. – С. 9804-9828.
3. Batischeva K.A., Orlova E.G., Feoktistov D.V. Investigation of drop geometry at free-falling process depending on volume of dozing // EPJ Web of Conferences. – 2015. – Т. 82. – С. 1-4.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ ИНТЕНСИВНОСТИ ИОНИЗИРУЮЩЕГО ИЗЛУЧЕНИЯ
В ЕМКОСТИ ПРИ ИЗМЕНЕНИИ КАЧЕСТВЕННОГО СОСТАВА РАСТВОРА**

С.В. Белявский

Научный руководитель: Е.П. Зеленецкая

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: shetlandalexander@gmail.com

**STUDYING OF IONIZING RADIATION DEPENDENCE ON CHANGING OF QUALITATIVE
COMPOSITION IN VOLUME WITH SOLUTION**

S.V Belyavsky

Scientific Supervisor: E.P. Zelenetskaya

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: shetlandalexander@gmail.com

***Abstract.** In present study there is an investigation of the influence of qualitative composition of solution on the value of intensity of ionizing radiation. There were obtained values of densities for different materials (distillated water, $CuSO_4$ solution, aluminum, lead) and compared with theoretical values. Besides there were obtained spectrum for attenuated gamma rays and compared with initial gamma-spectrum of Co^{60} source.*

Введение. В современном ядерном топливном цикле вопросы обращения с облученным ядерным топливом крайне важны ввиду возможности замыкания ЯТЦ, и соответственно, переработки ОЯТ в топливо для реакторов на быстрых нейтронах (БН-800, БРЕСТ-ОД 300). Однако за время хранения ОЯТ в хранилищах, радиоактивные изотопы участвуют в ядерных реакциях внутри контейнеров-хранилищ и их концентрация, а также порождаемое ими поле ионизирующего излучения изменяются.

Но вскрытие контейнера с ОЯТ с целью измерений не является эффективным методом с точки зрения безопасности. Данная процедура необходима не только для переработки ОЯТ, но и для выделения из отходов различных изотопов, необходимых в промышленности и медицине. Это достигается при помощи процесса аффинажа, в котором изотопы в растворе отделяются от осколков деления.

Следовательно, возникает необходимость в разработке системы бесконтактного определения качественного и количественного состава вещества, находящегося в контейнере. Кроме этого, подобного рода системы должны быть в состоянии определить распределение ионизирующего излучения по занимаемому ОЯТ объему.

Поэтому, целью исследования является изучение изменения интенсивности ионизирующего излучения при прохождении через растворы с различным качественным составом и определения их плотности для создания полноценной системы детектирования делящихся веществ в объеме контейнера временного хранения.

Материалы и методы. Экспериментальный стенд состоит из источника гамма-излучения, окруженного парафиновыми блоками, призматической прозрачной ёмкости с раствором и детектора ионизирующего излучения. В качестве источника гамма-излучения был использован изотоп Co^{60} с

энергиями испускаемых γ -квантов 1,1732 (1,169 в эксперименте) МэВ и 1,3325 (1,329 в эксперименте) МэВ [1]. В качестве детектора был применен сцинтилляционный детектор (NaI), подключенный к ЭВМ для обработки данных. Обработка данных детектора производилась при помощи ПО SCINTITRACT. Расстояние между детектором и источником – 8 см. Внешний вид стенда и его геометрия представлены на рисунке 1.



Рис. 1. Экспериментальный стенд

Проведены серии экспериментов по пять измерений для каждого материала. Время каждого измерения установлено экспериментально (300 секунд) исходя из времени набора оптимальной статистики (на каждый пик должно приходиться как минимум 10000 счётов).

Расчёт экспериментальных значений плотности произведен, основываясь на законе ослабления светового излучения Бугера-Ламберта-Бэра [2].

$$\rho = \frac{\ln\left(\frac{I_0}{I}\right)}{\mu_m \cdot x},$$

где I_0 – интенсивность гамма-излучения до прохождения через материал; I – ослабленная интенсивность гамма-излучения после прохождения через материал; μ_m – массовый коэффициент ослабления в исследуемом материале, $\text{г}/\text{см}^2$; x – толщина материала.

Расчёт массового коэффициента ослабления для составных материалов произведен в среде MATLAB по методике, предложенной Jaroslaw Tuszynski [3]. Данная методика позволяет рассчитать различные параметры при ослаблении гамма излучения, а именно: линейный, массовый, массово-энергетический коэффициенты ослабления гамма-излучения для различных энергий гамма-квантов в широком диапазоне (0,001 МэВ – 100 ГэВ), количество поглощенных в исследуемом материале гамма-квантов, толщину исследуемого материала для ослабления излучения в 2 раза / 10 раз, а также длины пробега гамма-квантов в исследуемом материале).

В качестве I_0 было принято значение интенсивности при прохождении гамма-излучения через воздух ввиду пренебрежимо малого массового коэффициента ослабления гамма-излучения для 1,169 МэВ.

Результаты. После проведения серии экспериментов получены спектры гамма-излучения (рис.2) и измеренные значения интенсивности после прохождения через материал. После обработки данных получены экспериментальные значения плотностей (рис.3, таблица 1).

Таблица 1

Сравнение табличных значений плотности с измеренными при помощи стенда

	Вода	Свинец	Алюминий	Медный купорос (2,75%)
$\rho_{\text{теор}}, \text{г}/\text{см}^3$	1,00	11,34	2,70	1,03
$\rho_{\text{эксп}}, \text{г}/\text{см}^3$	0,94	9,94	2,03	1,08

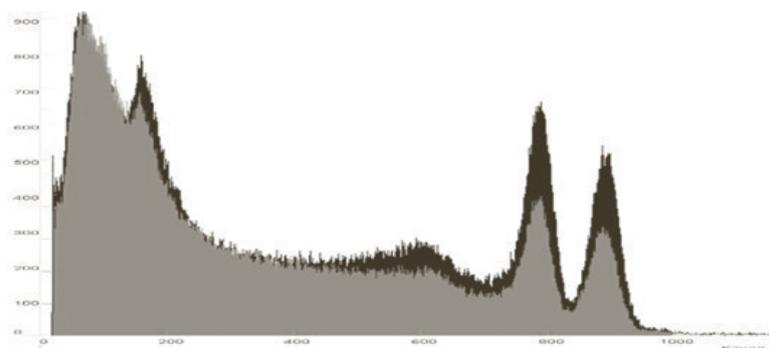


Рис. 2. Спектры Co^{60} : исходный (черный) и после прохождения через воду (серый)

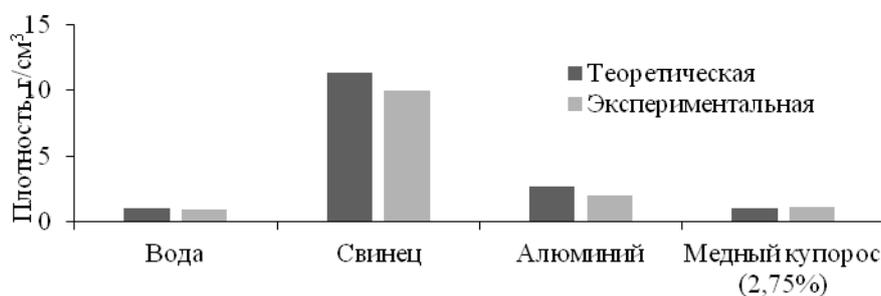


Рис. 3. Сравнение теоретических и измеренных экспериментально значений плотности

Заключение. Полученные данные показывают, что незначительные изменения плотности (начиная от одной сотой г/см³) отражаются на спектре: площадь пика 1,169 МэВ после прохождения излучения через слой 2,5% раствора $CuSO_4$ уменьшилась на 400 счетов по сравнению с площадью пика 1,169 МэВ после прохождения через слой воды.

Полученные значения плотности отличаются от теоретических значений в зависимости от материала. Для воды и раствора медного купороса погрешность составила 6%. Для алюминия и свинца погрешность измерения составила около 14%. Это может быть вызвано температурными факторами, отсутствием вакуума между источником и детектором, принятой I_0 интенсивность при прохождении гамма-излучения через воздух, отсутствием коллимирования пучка гамма-излучения.

Данные факторы, влияющие на погрешность, планируется принять во внимание и учесть их в существующей модели ослабления гамма-излучения для создания полноценной детектирующей установки.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Meisberger L. L., Keller R. J., Shalek R. J. The effective attenuation in water of the gamma rays of gold 198, iridium 192, cesium 137, radium 226, and cobalt 60 //Radiology. – 1968. – Т. 90. – №. 5. – С. 953-957.
2. Attix F. H. Introduction to radiological physics and radiation dosimetry. – John Wiley & Sons, 2008.
3. Jaroslaw Tuszynski. Photon Attenuation [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://ch.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/12092-photonattenuation>. – 25.04.08.

**АНАЛИТИЧЕСКИЙ РАСЧЁТ ТРЕЩИНОСТОЙКОСТИ МАТЕРИАЛОВ
ПО ДАННЫМ ИСПЫТАНИЙ МАЛОРАЗМЕРНЫХ ОБРАЗЦОВ С ШЕВРОННЫМ НАДРЕЗОМ**А.А. Богданов¹Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. Е.Е. Дерюгин²¹Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН,

Россия, г. Томск, пр. Академический, 2/4, 634021

E-mail: paradox_of_plenty@mail.ru**ANALYTICAL CALCULATION OF FRACTURE TOUGHNESS OF MATERIALS
ON TESTS OF SMALL-SIZED SAMPLES WITH A CHEVRON NOTCH**A.A. Bogdanov¹Scientific Supervisor: Prof., Dr. Ye.Ye. Deryugin²¹Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050²Institute of Strength Physics and Materials Science of the SB RAS, Russia, Tomsk, Academic str., 2/4, 634021E-mail: paradox_of_plenty@mail.ru

Abstract. *On the example of technical titanium VT1-0, a new technique for determining the crack resistance of materials is described in the data of tests of small-sized samples with a chevron notch. The problem of displacement the points of application of the part load due to the variation in the compliance of the sample during the propagation of a crack is solved. Equations for the calculation of the specific fracture energy from the experimental data of small-sized samples with a chevron notch are obtained.*

Введение. В настоящее время существуют аналитические и численные способы расчета трещиностойкости материалов. Преимуществом аналитического метода является скорость расчёта т.к. нет необходимости в моделировании процесса разрушения и геометрии образца. Численный метод требует длительного времени, а также большого ресурса вычислительных систем. При разработке аналитических методов принято проводить их проверку численными методами. Наиболее широко применяется метод испытания образцов стандартных размеров с предварительно нанесенной на них усталостной трещиной [1]. Этот метод построен на измерении характеристик диаграмм нагружения, а также длины полученной трещины, и последующем расчете характеристик трещиностойкости по полуэмпирическим формулам. Наиболее важная характеристика трещиностойкости – критический коэффициент интенсивности напряжений I рода (для трещины отрыва). Для корректности производимых стандартных испытаний требуется условие плоско-деформированного состояния нагружаемого образца, поэтому для этого используют образцы толщиной не менее 10 мм.

Применяемые способы имеют следующие недостатки: невозможность оценки трещиностойкости материала образцов малой толщины; требование нанесения предварительной усталостной трещины; металлоёмкость образцов; необходимость в нагружаемом оборудовании большой мощности;

необходимость периодически разгружать образец, чтобы оценить изменение его податливости; наличие феноменологических констант в уравнениях расчёта для учёта геометрии образца и условий нагружения.

Существующие аналитические методы расчета пригодны для расчёта образцов простой конфигурации – двухконсольный образец с прямолинейным надрезом. Недостатком прямолинейного надреза является то, что образовавшаяся трещина не распространяется вдоль плоскости надреза.

При испытании малоразмерных образцов, как правило, используют образцы с шевронным надрезом. Использование образцов с шевронным надрезом позволяет задавать направление распространения трещины и делает его стабильным [2]. Под действием нагрузки на конце шеврона возникает концентрация напряжений и зарождается трещина, что исключает необходимость предварительного нанесения усталостной трещины.

В настоящей работе излагается метод аналитического расчёта трещиностойкости двухконсольного образца с шевронным надрезом, разработанный в лаборатории физической мезомеханики ИФПМ СО РАН. Метод позволяет определить характеристики трещиностойкости без жестких ограничений на пластическую деформацию образца. В расчётных формулах нет эмпирических констант и феноменологических зависимостей. Характеристики трещиностойкости получают в условиях непрерывного нагружения, без операции «нагрузка-разгрузка».

Метод исследования и материалы. Для определения условия разрушения малоразмерных образцов используется энергетический подход. Формулировка энергетического критерия разрушения такова: рост трещины может быть только в том случае, если система способна выделить энергию, необходимую для начала распространения трещины. Эта энергия появляется за счет упругой деформации, возникающей в объеме материала при приложении внешней силы. Критическая скорость высвобождения упругой энергии при распространении трещины G_c является характеристикой, позволяющей оценить трещиностойкость образцов малых размеров [3]. Данная характеристика имеет размерность кДж/м². Для краткости далее будем называть ее удельной энергией разрушения (УЭР).

Распространение трещины сопровождается увеличением податливости η образца:

$$\eta = \lambda_e / P,$$

где P – нагрузка, λ_e – смещение точки приложения нагрузки при упругой деформации образца.

На стадии стабильного распространения трещины УЭР определяется изменением податливости в процессе распространения трещины:

$$G = \frac{P^2 d\eta}{2adl},$$

где a – толщина образца (рис. 1).

Критическую удельную энергию разрушения определяли по методике, разработанной в лаборатории физической мезомеханики ИФПМ СО РАН, согласно формуле:

$$G_c = \frac{3E\lambda_e^2 b^3}{16l^4}. \quad (1)$$

Величина упругого прогиба балки образца с шевронным надрезом равна:

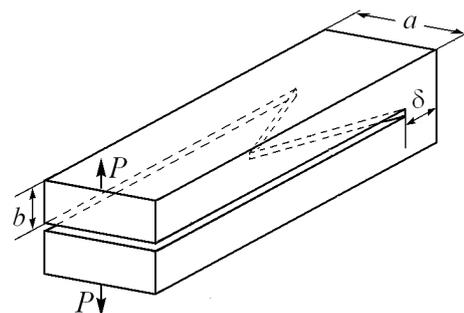


Рис. 1. Образец с шевронным надрезом

$$\lambda_c = \frac{8P}{Ea} \left(\frac{l}{b} \right)^3 \left[\frac{2\Delta l}{a} \tan \frac{\alpha}{2} + \left(1 - \frac{2\Delta l}{a} \tan \frac{\alpha}{2} \right) \left(\frac{l}{l_0} \right) \frac{4 + \frac{a}{l_0} \cot \frac{\alpha}{2} + \frac{2\Delta l}{l_0}}{\left[2 + \frac{a}{l_0} \cot \frac{\alpha}{2} \right]^2} \right]^{-1}, \quad (2)$$

Уравнения (1) и (2) выведены на основе определяющих уравнений механики разрушения. Рассчитав λ_c по формуле (2) и подставив полученное значение в (1), получим критическое значение УЭР. Переход от УЭР к коэффициенту интенсивности напряжений K_I осуществляется согласно зависимости [4]:

$$K_I = \sqrt{\frac{EG}{1-\nu^2}},$$

где E – модуль Юнга, ν – коэффициент Пуассона.

Настоящая методика применена для расчета трещиностойкости технического титана BT1-0, характеризуемого значениями упругих характеристик $E = 110$ ГПа и $\nu = 0.3$.

Результаты. На рис. 2 приведена экспериментальная диаграмма нагружения « P - λ_c ». Используя описанную в работе

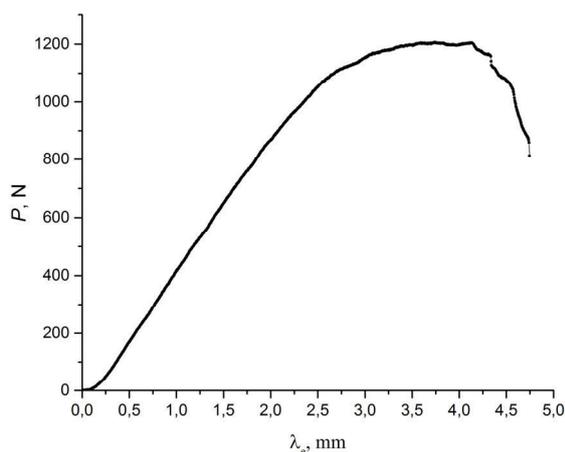


Рис. 2. Диаграмма нагружения образца BT1-0

методику для малоразмерных образцов из технического титана BT1-0, получены следующие характеристики трещиностойкости: критическая величина удельной энергии разрушения $G_c = 26.05$ кДж / м² и критический коэффициент интенсивности напряжений $K_{Ic} = 56.12$ МПа · √м. Трещина возникает еще до достижения максимума нагрузки. Значение G_c высчитано при максимальном значении внешней нагрузки, при которой наблюдается стабильное распространение трещины.

Заключение. В данной работе описан новый метод определения трещиностойкости конструкционных материалов с использованием малоразмерных образцов с шевронным надрезом. В расчетных формулах отсутствуют феноменологические зависимости и эмпирические константы. Значения, полученные на примере расчёта характеристик трещиностойкости технического титана BT1-0, соответствуют данным стандартных методов испытаний [5].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Методы механических испытаний металлов. Определение характеристик трещиностойкости (вязкости разрушения) при статическом нагружении. ГОСТ 25.506-85. – 1985. – М: Издательство стандартов.
2. Дроздовский Б.А., Полищук Т.В., Волков В.П. Шевронный надрез как средство уменьшения толщины образца при определении величины K_{Ic} // Заводская лаборатория. – 1987. – № 6. – С. 74-76.
3. Тимошенко С.П., Гудьер Дж. Теория упругости. – 1975. М.: Наука. – 576 с.
4. Брок Д. Основы механики разрушения. – М: Высшая школа. – 1980.
5. Ильин А.А., Колачев Б.А., Полькин И.С. Титановые сплавы. Состав, структура, свойства. Справочник. – М.: ВИЛС-МАТИ, 2009. – 520 с.

**ЗАКОНОМЕРНОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ В ПРОЦЕССЕ 3D-ПЕЧАТИ
ТИТАНОВЫХ СПЛАВОВ**

А.О.Буйлук, И.О.Акимченко

Научный руководитель: д. ф-м. н. А.В. Панин

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: buyluk97@mail.ru

REGULARITIES OF STRUCTURE FORMATION OF TITANIUM ALLOYS DURING 3D PRINTING

A.O.Buyluk, I.O.Akimchenko

Scientific Supervisor: Dr. P-M. S. A.V. Panin

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: buyluk97@mail.ru

***Abstract.** Currently, 3D printing and additive technologies are being given a lot of attention in research centers in the whole world. Since titanium is chemically active metal, electron-beam technologies appear to be the most promising for the development of technology of metal 3D-surfacing of details from alloys based on titanium. In the present study, we performed comparative analysis of the microstructure and mechanical properties of commercially pure titanium and Ti-6Al-4V titanium alloy parts obtained by additive manufacturing.*

Введение. Современные темпы развития промышленности требуют выбора технологий производства, обеспечивающие наименьшие затраты и сокращение срок производства. Наряду с новыми и передовыми технологиями можно отметить быстрое развитие аддитивных технологий, позволяющих создавать металлические изделия уникальной формы. Основными методами получения трехмерных металлических изделий в настоящее время являются методы селективного лазерного и электронно-лучевого сплавления [1, 2]. Причем, поскольку процесс электронно-лучевого сплавления происходит в вакууме, то это позволяет получать качественные изделия из титана и титановых сплавов, характеризующихся высокой химической активностью при повышенных температурах. Целью работы являлось проведение сравнительного анализа образцов титана ВТ1-0 и ВТ6, полученных прокаткой и методом 3D-печати, а также исследование их термической стабильности.

Материалы и методы. Материалами исследования были выбраны образцы технического титана ВТ1-0 и сплава ВТ6, полученные прокаткой (в состоянии поставки) и методом электронно-лучевого сплавления соответствующего порошка. 3D-печать осуществлялась на установке ЭЛУ-5 (ИФПМ СО РАН, г. Томск). Для исследования термической стабильности 3D-напечатанные образцы подвергали отжигу в вакууме при температуре 900°C в течение 1 часа. Микроструктуру образцов изучали на оптическом микроскопе ZEISS AXIOVERT 40 MAT. Рентгеноструктурный и фазовый анализ проводили на дифрактометре SHIMADZU XRD-7000. Микротвердость измеряли на твердомере ПМТ-3 при нагрузке 50 грамм.

Результаты. На рисунках 1 и 2 представлены изображения микроструктур исследуемых образцов. Микроструктура прокатанного образца титана ВТ1-0 представляет собой равноосные зерна со средним диаметром 50-100 мкм (рис. 1а). В отличие от прокатанных образцов структура 3D- напечатанного

титана VT1-0 представляет собой хаотично расположенные пластины, поперечный размер которых достигает 5-10 мкм (рис. 1б). Последующий отжиг 3D-напечатанных образцов VT1-0 приводит к существенному изменению структуры (рис. 1в). В одних зернах пластины практически исчезают, в других зернах наблюдаются тонкие пластины с одинаковой ориентацией.

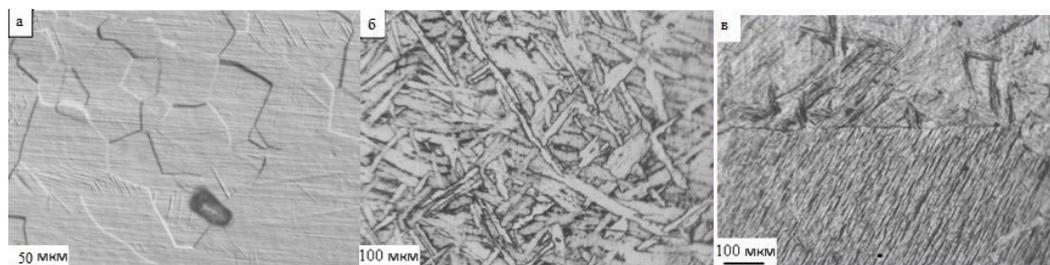


Рис. 1. Оптические изображения микроструктуры образцов технического титана VT1-0, полученных прокаткой (а) и методом 3D-печати (б, в) и подвергнутых последующему отжигу в вакууме при температуре 900 °С в течение 1 часа (в)

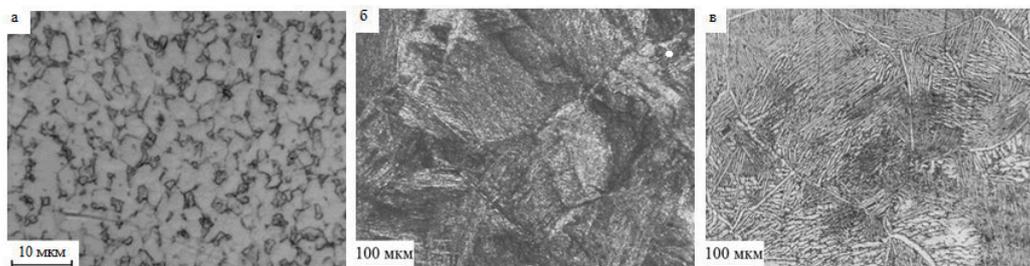


Рис. 2. Оптические изображения микроструктуры образцов титанового сплава VT6, полученных прокаткой (а) и методом 3D-печати (б, в) и подвергнутых последующему отжигу в вакууме при температуре 900 °С в течение 1 часа (в)

Микроструктура прокатанного образца титанового сплава VT6 представляет собой равноосные зерна, размер которых варьируется от 1 до 3 мкм (рис. 2а). При этом незначительная часть зерен имеет пластинчатую морфологию. При 3D-печати образцов из титана VT6 образуются равноосные зерна, средний размер которых составляет 200-300 мкм, т.е. на несколько порядков больше, чем в состоянии поставки (рис.2б). Внутри зерен наблюдается пластинчатая морфология, поперечный размер пластин составляет 5-9 мкм. Отжиг 3D-напечатанного образца из титанового сплава VT6 приводит к дальнейшему увеличению размеров зерен. Как видно из рис.2в, средний размер зерен достигает 500 мкм. Следует отметить, что поперечные размеры пластин внутри зерен также увеличились.

Микротвердость образцов VT1-0 в состоянии поставки составляет 2200 МПа (Таблица 1). В 3D-напечатанном образце VT1-0 микротвердость увеличивается до 2900 МПа и уменьшается при последующем отжиге в вакууме при температуре 900°С в течение 1 часа до 2300 МПа, то есть приближается к микротвердости образца, находящегося в состоянии поставки. Для образцов титана VT6, полученных методом 3D-печати, также характерна более высокая микротвердость (4200 МПа) по сравнению с микротвердостью прокатанных образцов VT6 (3175 МПа). После отжига при температуре 900°С в вакууме в течение 1 часа микротвердость 3D-напечатанного образца VT6 также существенно уменьшается.

Таблица 1

Таблица значений микротвердости и результатов рентгеноструктурного анализа

Образец	Фазы	Содержание фаз, %	Параметры решетки, Å	Твердость, МПа
BT1-0 поставка	α	100	a=2,909 c=4,7679	2200
BT1-0 печать	α	100	a=2,9521 c=4,6898	2900
BT1-0 отжиг после печати	α	100	a=2,9517 c=4,6803	2300
BT6 поставка	α	92,5	a=2,9280 c=4,6628	3175
	β	7,5	a=3,2469	
BT6 печать	α	97	a=2,9339 c=4,6767	4200
	β	3	a=3,2383	
BT6 отжиг после печати	α	91,1	a=2,9241 c=4,6751	3500
	β	8,9	a=3,2223	

Результаты рентгеноструктурного анализа показали, что структура и фазовый состав 3D-напечатанных образцов титанового сплава BT1-0 полностью соответствуют прокатанным образцам BT1-0. В то же время, в образцах 3D-напечатанного титанового сплава BT6 количество β -Ti не превышает 3%, в то время как в состоянии поставки содержание β -фазы составляет 7,5%. Однако при последующем отжиге образцов 3D-напечатанного сплава BT6 объемная доля β -фазы увеличивается до 8,9%.

Закключение. Образцы технического титана BT1-0, полученные методом электронно-лучевого сплавления порошка, состоят из равноосных зерен со средним размером 50-100 мкм, внутри которых выявляются хаотично расположенные пластины α -фазы, поперечный размер которых достигает 5-10 мкм. Последнее обуславливает более высокую микротвердость 3D-напечатанных образцов по сравнению с прокатом. Микроструктура 3D-напечатанных образцов титанового сплава BT6 также характеризуется крупными равноосными зёрнами, имеющими пластинчатую морфологию. Количество β -Ti в образцах BT6, полученных методом 3D печати, не превышает 3%, при этом их микротвердость составляет 4200 МПа.

Термический отжиг 3D-напечатанных образцов BT1-0 и BT6 приводит к увеличению среднего размера зерна и изменению поперечных размеров пластин α -фазы, обуславливая существенное снижение их микротвердости. При этом объемная доля β -фазы в образцах напечатанного сплава BT6 увеличивается до 8,9%.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зленко М.А. Аддитивные технологии в машиностроении / М.В. Нагайцев, В.М. Довбыш // пособие для инженеров. М. ГНЦ РФ ФГУП «НАМИ» 2015. 220 с.
2. Гончарова О.Н., Бережной Ю.М., Бессарабов Е.Н., Кадамов Е.А., Гайнутдинов Т.М., Нагопетьян Е.М., Ковина В.М. Аддитивные технологии – динамично развивающееся производство: Справочник: инженерный вестник № 4.2016.

**ВЛИЯНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ И ФАЗОВОГО СОСТАВА НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
КОМПОЗИТА ZrO_2 - MgO С БИМОДАЛЬНОЙ ПОРОВОЙ СТРУКТУРОЙ**

А.С. Буюков, Е.О. Васильева, Д.А. Ткачев

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. С.Н. Кульков

Национальный исследовательский Томский государственный университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050

E-mail: alesbuyakov@gmail.com

**EFFECT OF MICROSTRUCTURE AND PHASE COMPOSITION ON MECHANICAL PROPERTIES
OF THE COMPOSITE ZrO_2 - MgO WITH A BIMODAL PORE STRUCTURE**

A.S. Buyakov, E.O. Vasilyeva, D.A. Tkachev

Scientific Supervisor: Prof., Dr. S.N. Kulikov

National Research Tomsk State University,

Russia, Tomsk, Lenin Avenue, 36, 634050

E-mail: alesbuyakov@gmail.com

***Abstract.** In this paper porous ceramics based on the ZrO_2 - MgO system were studied. It was shown, that the addition of an organic pore-forming particles make it possible to obtain a bimodal pore structure. X-ray diffraction analysis showed that with the increasing of MgO concentration, the average size of ZrO_2 and MgO crystallites grows up and their crystal lattice microdistortion decrease. Strength with increasing of MgO concentration is increasing and the dependence of compressive strength from microstresses was found.*

Введение. В настоящее время крайне актуальными являются исследования, посвященные вопросам изучения деформационного поведения и, как следствие, закономерностей формирования прочностных свойств пористых керамических материалов с целью разработки методов направленного управления их механическими характеристиками. Среди таких керамик можно выделить композиты на основе ZrO_2 , благодаря особым эксплуатационным характеристикам [1].

Из исследований, посвященных композитам, на основе диоксида циркония, видно, что особое внимание уделено диоксиду циркония, стабилизированному оксидом магния (ZrO_2 - MgO). Несмотря на то, что система ZrO_2 - MgO изучена рядом авторов [2, 3], исследования проводились в области концентраций MgO до 20 мол.% [4], незначительно превышающей предел растворимости оксида магния в ZrO_2 при образовании твердого раствора.

Цель исследований – изучение влияния состава и параметров спекания пористого керамического композита ZrO_2 - MgO на его механические параметры.

Материалы и методы исследования. В работе исследованы пористые керамические материалы ZrO_2 - MgO , полученные методом холодного одноосного прессования механических смесей порошков диоксида циркония, стабилизированного 3 мол % оксидом магния $ZrO_2(MgO)$, и оксида магния (MgO) в концентрации 0-100 мас. % с последующим спеканием при температуре 1600 °C и изотермической выдержкой 10-600 мин.

Объем порового пространства керамик, 70 %, был получен путем введения в исходные порошковые составы органических порообразующих частиц со средним размером 100 мкм, отожжёнными во время спекания при изотермической выдержке при 300 °С. Оценка пористости производилась с помощью гидростатического взвешивания.

Рентгеноструктурный анализ проводился с фильтрованным излучением $\text{CuK}\alpha$ в угловом диапазоне 2θ от 10° до 115° . Оценены средний размер кристаллитов и микроискажений кристаллической решетки с помощью метода графического построения уравнения Холла-Вильямсона [5].

Предел прочности при радиальном сжатии определен с помощью универсальной испытательной машины с постоянной скоростью деформации $7 \cdot 10^{-4} \text{с}^{-1}$.

Результаты. Введение органических порообразующих частиц позволило получить поровую структуру с бимодальным распределением пор со средним размером 35 и 3 мкм, при спекании с высокотемпературной выдержкой 10 мин. С увеличением длительности высокотемпературной выдержки происходит уменьшение среднего размера макропор до 40 мкм, и увеличение микропор до 8 мкм, что объясняется проявлением механизма коалесценции пор.

Рентгеноструктурный анализ показал, что керамика представлена преимущественно кубической фазой ZrO_2 . Моноклинная фаза ZrO_2 присутствует только в зоне низких концентраций MgO . С ростом содержания MgO в составе и увеличения длительности высокотемпературной выдержки происходит рост среднего размера кристаллитов MgO , рисунок 1 а. Рост кристаллитов кубического ZrO_2 происходит с ростом концентрации MgO до 50 мас. %, почти не изменяясь в дальнейшем, рисунок 1 б.

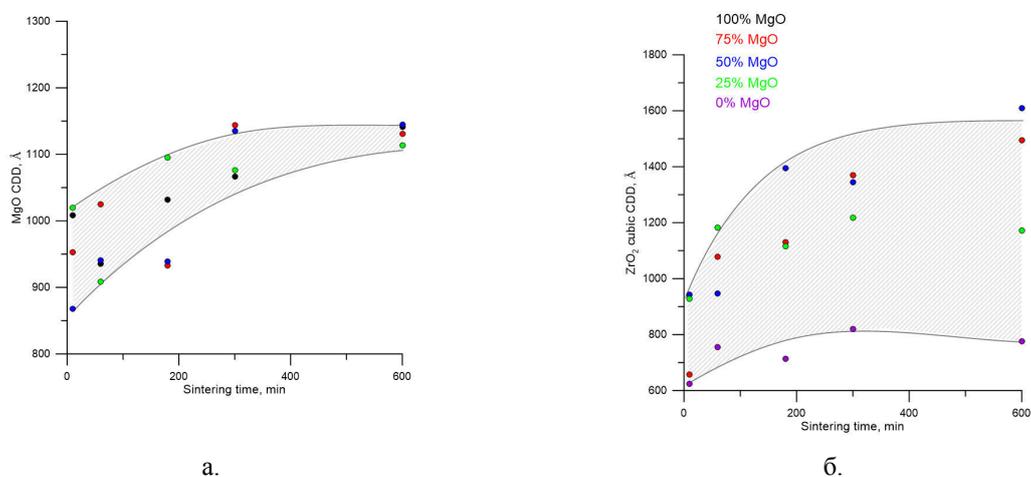


Рис. 1. Зависимость среднего размера кристаллитов от длительности высокотемпературной выдержки: а. MgO ; б. Кубическая фаза ZrO_2 .

Микроискажения кристаллической решетки с ростом кристаллитов ZrO_2 и MgO снижаются. По средним значениям микроискажений возможно оценить величину напряжений второго рода, как произведение микроискажений кристаллической решетки на модуль упругости.

Предел прочности исследуемой керамики при осевом сжатии растет с ростом концентрации MgO и увеличением длительности высокотемпературной выдержки. Анализ зависимости прочности от действующих в объеме материала микронапряжений показал, что рост напряжений второго рода приводит к снижению прочностных свойств керамики, рисунок 2.

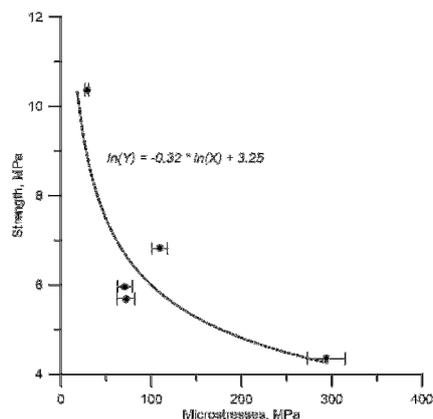


Рис. 2. Зависимость предела прочности при осевом сжатии от напряжений второго рода.

Выводы. В работе показано, что введение органических порообразующих частиц в исходные порошковые составы при получении керамических материалов позволяет получить бимодальную пористость, при чем макропоры наследуют морфологию частиц порообразователя, а микропоры обусловлены наличием межчастичных пустот при компактировании порошковых смесей.

Предел прочности исследуемой системы при радиальном сжатии растет с увеличением содержания MgO в составе и снижается, с ростом средней величины напряжений второго рода в композите.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках Соглашения № 14.584.21.0026 (RFMEFI58417X0026).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Weigelt C. Compressive and tensile deformation behaviour of TRIP steel-matrix composite materials with reinforcing additions of zirconia and/or aluminium titanate (2017). Journal of Alloys and Compounds. no. 2, pp. 138-142.
2. Davar F. et al. Development of ZrO₂–MgO nanocomposite powders by the modified sol–gel method (2017). International Journal of Applied Ceramic Technology. no. 2, pp. 211-219.
3. Кульков С. Н., Буякова С. П. Фазовый состав и особенности формирования структуры на основе стабилизированного диоксида циркония. Российские нанотехнологии, 2007. – Т. 2. – №. 2. – С. 119-132.
4. Kulkov S. N., Buyakova S., Gömze L. A. Zirconia-Based Powders Produced by Plasma-Spray Pyrolysis and Properties of Sintered Ceramics (2016). Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing. no. 1, p. 012015.
5. Gocmez H., Fujimori H. Synthesis and characterization of ZrO₂–MgO solid solutions by citrate gel process (2008). Materials Science and Engineering: B. no. 1, pp. 226-229.

**РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ПРОИЗВОДСТВА РАДИОНУКЛИДА ГЕРМАНИЯ-68 ПРИ
ОБЛУЧЕНИИ ОБОГАЩЁННОГО ИЗОТОПА ЦИНКА-66 НА ЦИКЛОТРОНЕ Р7М**

Н. Вилья, Г.С. Модебадзе

Научный руководитель: Инженер. Б.А. Михайлович

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: nekros@sibmail.com

**DEVELOPMENT OF A GERMANIUM-68 RADIONUCLIDE PRODUCTION TECHNOLOGY BY
IRRADIATION OF ENRICHED ISOTOPE ZINC-66 IN THE R7M CYCLOTRON**

N. Villa, G.S. Modebadze

Scientific Supervisor: Engineer. B.A. Mikhailovich

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: nekros@sibmail.com

***Abstract.** In the present study, we performed the evaluation and experimental determination of ^{68}Ge production using alpha particle beams in the R7M cyclotron of the Tomsk Polytechnic University.*

Введение. Позитронно-эмиссионная томография (ПЭТ) является мощным диагностическим методом визуализации и стала доминирующим методом визуализации в области ядерной медицины. В связи с этим требуются новые радионуклиды, и их развитие вызвало значительный интерес [1]. Радионуклид германий-68 (^{68}Ge) используют в позитронно-эмиссионной томографии. Распад ^{68}Ge в $^{68}\text{Ge}/^{68}\text{Ga}$ генераторе приводит к получению дочернего радионуклида ^{68}Ga . Период полураспада ^{68}Ga , равный 67,71 минуты, достаточен для синтеза множества РФП для ПЭТ на основе ^{68}Ga . Препараты ^{68}Ga применяют при оценке целостности гематоэнцефалитического барьера и для локализации злокачественных опухолей. ^{68}Ga используют также как калибровочный источник для настройки сканеров ПЭТ. Период полураспада ^{68}Ge – 270,8 дней. Для получения ^{68}Ge можно использовать реакции $\text{Zn}(\alpha, \text{n})^{68}\text{Ge}$ и по реакции $\text{Ga}(\text{p}, \text{x})^{68}\text{Ge}$. Выход ^{68}Ge в реакции $^{69}\text{Ga}(\text{p}, \text{x})^{68}\text{Ge}$ при энергии протонов 30 МэВ равен 2,46 (МБк/мкАч), в то время как выход в реакции $^{66}\text{Zn}(\alpha, 2\text{n})^{68}\text{Ge}$ при энергии протонов 28 МэВ равен 0,0437 (МБк/мкАч). Однако, несмотря на относительно малый выход реакция $^{66}\text{Zn}(\alpha, 2\text{n})^{68}\text{Ge}$ тоже может найти применение, если имеется дефицит ^{68}Ge . Цель настоящей работы заключалась в том, чтобы дать ответ насколько такая возможность может быть использована как для получения ^{68}Ge требуемого качества, так и для технико-экономического обоснования его производства.

Материалы и методы исследования. Облучения проводились в циклотроне Р7М Томского политехнического института, на котором можно получить пучок альфа-частиц с энергией до 28 МеВ и ток 50 мкА (Рис. 1. Циклотрон Р7М). Следует отметить, что в ускорительной камере циклотрона ток пучка, по крайней мере, в 2 раза больше.



Рис. 1. Циклотрон P7M

Для измерения потока альфа частиц использовался материал подложки мишени – медь, материал вещества монитора - медная фольга (Рис. 2). Масса фольги - 0,4478 г, диаметр - 40,0 мм. Удельная плотность фольги – 0,03565 г/см². Облучение производили на выведенном пучке альфа частиц в вакууме на 3 канале циклотрона P7M. Режим настройки циклотрона: частота $f = 11040000$ Гц, радиус вывода частиц $r = 53$ см. Время облучения - 10 мин, ток альфа частиц 5 мкА. Энергия α -частиц, рассчитанная исходя из частоты ускоряющего поля и радиуса вывода равна $E\alpha = 8,2 \cdot 10^{-11} (f \cdot r)^2$; $E\alpha = 8,2 \cdot 10^{-11} (11,04 \cdot 10^6 \cdot 53)^2 = 28,07$ МэВ:



Рис. 2. Мишень с фольгой, приклеенной на теплопроводную пасту КПТ-8 (ГОСТ 19783-74)

В качестве мишени мы изготавливали фольгу из природного металлического цинка (Рис.2). Масса фольги – 0,779 г., диаметр 40 мм, массовая толщина 0,061 г/см². Фольга была припаяна к медной подложке на оловянный припой для облучения на выведенном пучке альфа-частиц на 3 канале циклотрона.



Рис.3. Мишень с припаянной Zn пластиной

Результаты. Для измерения потока альфа частиц был выбран метод активация медной фольги (рис. 3). Потери энергии α частиц при прохождении через медную фольгу, толщиной 0,03565 г/см², находим используя таблицу пробегов α -частиц в меди. Энергия альфа частиц на входе $E\alpha_{in} = 28$ МэВ, и на выходе $E\alpha_{out} = 22,65$ МэВ. Средняя энергия $E\alpha = 24,32$ МэВ. Активность радионуклида A равна $A = \sigma \cdot n \cdot F (1 - \exp(-\lambda t))$, где n – число ядер Cu на кв.см. $n = 6,02 \cdot 10^{23} \cdot 0,03565 / 63,54 = 3,37 \cdot 10^{20}$ см⁻²; $\sigma \cdot n =$

$3,37 \cdot 10^{20} \cdot 113,3 \cdot 10^{-27} = 3,82 \cdot 10^{-5}$; t_b - время облучения 600 с. Отсюда получаем поток альфа-частиц: $F = A / (\sigma \cdot n \cdot (1 - \exp(-\lambda t_b)))$, см^2 . Измеренная активность ^{66}Ga на ЕОВ оказалась равна $A = 4,83 \text{ МБк}$. $F = 4,83 \cdot 10^6 \cdot 2,1366 / (3,82 \cdot 10^{-5} \cdot (1 - \exp(-2,03 \cdot 10^{-5} \cdot 600))) = 4,83 \cdot 10^6 \cdot 2,1366 / (3,82 \cdot 10^{-5} \cdot 0,0121) = 2,2 \text{ Е13 частиц/с}$. Если принять, что ток 5 мкА возникает только от альфа-частиц, то число поток частиц будет равен $5 \cdot 6,25 \cdot 10^{12} / 2 = 1,56 \cdot 10^{13} \text{ частиц/с}$. Для измерения активности и выхода ^{68}Ge в реакции $\text{natZn}(\alpha, 2n)^{68}\text{Ge}$ мы использовали пучок альфа-частиц с энергией 28 МэВ. Время облучения 6 мин. Ток – 25 мкА. Заряд альфа частиц на мишени 2,5 мкАч. Измерение активности ^{68}Ge в Zn фольге производили с помощью спектрометра гамма излучения Canberra. Типичный аппаратурный спектр гамма излучения от образцов приведён на рис. 4. Время набора спектра $t_n = 3600$ с. Регистрировали γ -линию 1077,4 кэВ, возникающую при распаде ^{68}Ga . Эффективность регистрации гамма квантов с энергией 1077,4 кэВ - $\epsilon(1077,4)$ равна $2,03 \cdot 10^{-3}$, квантовый выход γ -линии (1077,4) $\eta = 3,2\%$, площадь под пиком $S = 6275$ импульса. Активность ^{68}Ge находили по формуле: $A(\text{EOB}) = \frac{S}{\epsilon \cdot t_m \cdot \eta \cdot e^{-\lambda t_d}}$; $A(^{68}\text{Ge}) = 6275 / (2,03 \cdot 10^{-3} \cdot 3600) = 28621 \text{ Бк}$. Поделив активность на заряд альфа-частиц получим величину выхода ^{68}Ge равной $2,86 \cdot 10^{-4} / 2,5 = 1,15 \cdot 10^{-4} = 0,0115 \text{ МБк/мкАч}$. По данным справочника П.П. Дмитриева выход ^{68}Ge из толстой мишени для $E_\alpha = 28 \text{ МэВ}$ равен $0,0122 \text{ МБк/мкАч}$, а для $E_\alpha = 18 \text{ МэВ}$ равен $0,00048 \text{ МБк/мкАч}$.

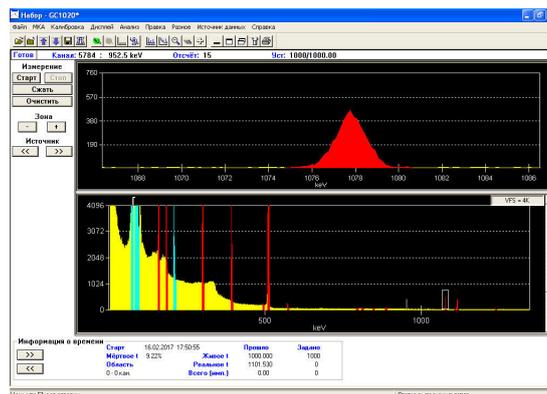


Рис.4. Типичный аппаратурный спектр гамма излучения образца №6 ($R = 5 \text{ см}$). Дата и время измерения: 16.02.17 18:00. Время набора спектра 1000 с

Заключение. 1. В пределах погрешности наблюдается удовлетворительное согласие показаний измерителя тока и потока альфа-частиц, найденного из активации медной фольги, что позволяет доверять показаниям прибора, измеряющего ток с мишени. 2. Отличие выхода ^{68}Ge из природного Zn при облучении пучком альфа-частиц по данным эксперимента и литературы не превышает 2%. 3. Примем, что выход ^{68}Ge из толстой мишени цинка природного изотопного состава под действием альфа-частиц ускоренных в циклотроне Р7М равен $0,0122 \text{ МБк/мкАч}$. 4. Если в качестве мишени использовать цинк, обогащенный до 95% по изотопу ^{66}Zn , то выход ^{68}Ge будет $(0,0122 \cdot 0,95 / 0,279) = 0,040 \text{ МБк/мкАч}$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Brambilla T.P. Studies on the preparation of ^{68}Ge - ^{68}Ga generator with inorganic materials // International Nuclear Atlantic Conference - INAC 2011.

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ НА ОСНОВЕ РЕДКОЗЕМЕЛЬНОГО
ЭЛЕМЕНТА И ПЕРЕХОДНОГО ИЛИ БЛАГОРОДНОГО МЕТАЛЛАА. Ю. Вязовская

Научный руководитель: к. ф.-м. н. М.М. Отроков

Национальный исследовательский Томский государственный университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050

E-mail: alex_vyaz93@mail.ruELECTRONIC STRUCTURE OF INTERMETALLICS BASED ON A RARE EARTH ELEMENT AND
A TRANSITION OR NOBLE METALA.Yu. Vyazovskaya

Scientific Supervisor: Ph.D. M.M. Otrokov

Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050

E-mail: alex_vyaz93@mail.ru

Abstract. *The results of ab initio study of resonant surface states genesis in the vicinity of $\bar{\Gamma}$ point for $GdRh_2Si_2$ are presented in this work. Our electronic band structure calculations have shown that the resonant surface states are already formed in three atomic layer slab Si-Rh-Si. The states localization within three layer slab causes its resonant nature and presence of these states on Si- and Gd- termination surfaces.*

Введение. Интерметаллиды, сочетающие в себе редкоземельный и переходный (либо благородный) металлы, на протяжении многих лет являются платформой для наблюдения таких свойств, как сверхпроводимость и флуктуации валентности, а также эффекта Кондо или квантового критического поведения. Фотоэмиссионные исследования систем REY_2Si_2 , где $RE = Eu, Gd, Ho, Yb$ или U , а $Y = Rh, Ru$ либо Co , позволили получить общую картину электронной структуры их Si-терминированной поверхности. Так, установлено, что электронный спектр кремниевой поверхности таких систем содержит как поверхностные состояния Шокли, располагающиеся в окрестности точки \bar{M} , так и резонансные состояния в точке $\bar{\Gamma}$ [1, 2]. Механизм происхождения поверхностных состояний типа Шокли общеизвестен. Они возникают в локальной (фундаментальной) запрещенной щели металла (полупроводника) вследствие ее инвертированного характера. В случаях $EuRh_2Si_2$, $GdRh_2Si_2$ и $HoRh_2Si_2$ поверхностное состояние Шокли в обратном пространстве находится в инвертированной щели в точке \bar{M} , а в прямом – локализуется в 4 - 5 поверхностных атомных слоях.

Отличием резонансных состояний, так же демонстрирующих высокую амплитуду вблизи поверхности, являются то, что они располагаются вне запрещенных щелей, вследствие чего они гибридизуются с объемными состояниями внутри кристалла. Их наличие не зависит от окончания поверхности, поскольку они наблюдаются как на Si, так и на Gd поверхностях.

В отличие от поверхностного состояния Шокли в точке \bar{M} , происхождение данного резонансного состояния в точке $\bar{\Gamma}$ в соединениях типа REY_2Si_2 (RE – редкоземельный элемент, редкоземельный элемент, Y – переходный либо благородный металл) не столь очевидно и механизм его формирования остается неисследованным. Таким образом, целью данной работы является теоретическое исследование

происхождения поверхностного резонансного состояния в точке $\bar{\Gamma}$ в соединениях типа REY_2Si_2 . Исследование проводилось на примере соединения $GdRh_2Si_2$.

Методы исследования. Первопринципные расчеты проводились в рамках метода проекционных плоских волн [3]. В расчетах для учета обменно-корреляционных эффектов использовалось обобщенное градиентное приближение [4]. В гамильтониан были включены скалярно-релятивистские поправки, а спин-орбитальное взаимодействие учитывалось по методу второй вариации [5].

Результаты. Для аккуратного описания сначала были рассмотрены электронные структуры Si- и Gd поверхностей (001) $GdRh_2Si_2$, рассчитанные для толстой 32-слойной как с учетом спин-орбитального и обменного взаимодействий, так и без их учета, показаны на рисунках 1 а и 1 б соответственно. Оранжевые символы на обеих панелях выделяют спектральные особенности, имеющие высокую плотность состояний на кремниевой поверхности – а именно поверхностное состояние Шокли в окрестности точки \bar{M} и резонансное состояние в точке $\bar{\Gamma}$. А зеленые символы – спектральные особенности, имеющие высокую плотность состояний на гадолиниевой поверхности, на которой, как видно, отсутствует состояние Шокли в точке \bar{M} .

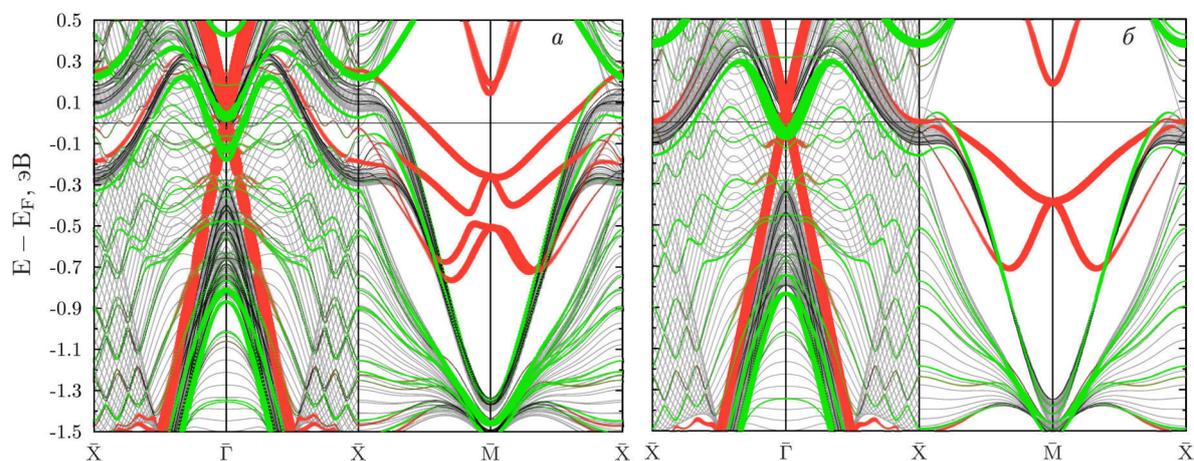


Рис. 1. Зонный спектр $GdRh_2Si_2$ (001), рассчитанный для 32-слойной пленки а) с учетом спин-орбитального и обменного взаимодействий и б) без учета этих взаимодействий

Принципиальным отличием представленных на рисунке спектров друг от друга является сохранение вырождения зон пленки по спину на панели б, снятое во всех точках k (за исключением точек пересечения зон в окрестности точки \bar{M}) на панели а. Указанное снятие вырождения происходит по причине формирования ферромагнитного состояния на кремниевой поверхности $GdRh_2Si_2$, действующего в комбинации с собственным спин-орбитальным расщеплением и расщеплением по типу Бычкова-Рашбы.

При исследовании вопроса о возникновении резонансного состояния в точке $\bar{\Gamma}$ мы сосредоточимся на обсуждении зонной структуры системы без учета указанных взаимодействий, что не влияет на сделанные выводы, поскольку данные взаимодействия не являются фундаментальной причиной возникновения указанных состояний.

Для выяснения происхождения резонансного состояния в точке $\bar{\Gamma}$ система $GdRh_2Si_2$ были рассмотрены пленки различных толщин, для каждой из которых была проанализирована зонная

структура. Структурным блоком минимальной толщины для данного соединения является последовательность слоев Gd-Si-Rh-Si. Сначала трислой Si-Rh-Si был разложен на отдельные слои с целью проследить эволюцию электронной структуры такой системы при изменении межплоскостного расстояния: от ситуации, описывающей невзаимодействующие слои до равновесного расстояния в объемном материале. Такие расчеты показали, что имеющееся уже в свободностоящем слое родия дырочное состояние d_{xy} симметрии, в образованном трехслойнике может быть идентифицировано как состояние, которое в толстых пленках будет названо резонансным. Его энергия связи, однако, существенно отличается от той, что имеет место на поверхности GdRh_2Si_2 . При переходе к толщине пленки в 4 атомных слоя дырочное состояние d_{xy} симметрии в точке $\bar{\Gamma}$ опускается в валентную зону и оказывается полностью занятым.

Поскольку кристаллическая структура рассматриваемого соединения, по сути, представляет собой чередование Si-Rh-Si-прослоек с монослойными вставками Gd, то локализация электронной и дырочной зон в Si-Rh-Si объясняет их резонансный характер, наблюдаемый в экспериментах на схожих соединениях.

Выводы. В рамках расчетов из первых принципов было исследовано происхождения резонансных состояний в окрестности точки $\bar{\Gamma}$ на примере соединения GdRh_2Si_2 . Результаты расчетов показали, что имеющие сложный генезис состояния в точке $\bar{\Gamma}$ начинают формироваться уже в 3-слойном блоке Si-Rh-Si. Поскольку структура REY_2Si_2 представляет собой укладку атомных плоскостей ...-Gd-Si-X-Si-Gd-Si-X-Si-..., данные состояния, локализуясь в каждом трислое, формируют континуум объемных состояний. При образовании поверхности происходит отделение локализующейся в поверхностном трислое квазидвумерной зоны от континуума объемных состояний, что обусловлено изгибом потенциала на поверхности. Данная зона приобретает резонансный характер вследствие гибридизации с объемными состояниями той же симметрии. Кроме того, локализация резонансных состояний в трислое Si-Rh-Si позволяет объяснить факт наличия данных состояний в электронном спектре поверхности независимо от окончания поверхности. Поскольку происхождение данных состояний не зависит ни от спин-орбитального взаимодействия ни от эффектов магнетизма, их генезис является общим для широкого класса соединений REY_2Si_2 ($X = \text{Co}, \text{Cu}, \text{Rh}, \text{Ag}, \text{Ir}$ и Au ; $\text{RE} = \text{Eu}, \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Dy}, \text{Ho}, \text{Er}$).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chikina A. et al. Strong ferromagnetism at the surface of an antiferromagnet caused by buried magnetic moments // Nature Communication. – 2014. – V. 5. – № 3171 – P. 1–5.
2. Güttler M. et al. Robust and tunable itinerant ferromagnetism at the silicon surface of the antiferromagnet GdRh_2Si_2 // Scientific Reports. – 2016 – V. 6. – P. 24254.
3. Blöchl P. E. Projector augmented-wave method // Phys. Rev. B. – 1994. – V. 50. – P. 17953–17979.
4. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple // Phys. Rev. Lett. – 1996. – V. 77. – № 18. – P. 3865–3868.
5. Koelling D. D., Harmon B. N. A technique for relativistic spin-polarised calculations // Journal of Physics C: Solid State Physics. – 1977. – V. 10. – № 16. – P. 3107.

АНАЛИЗ РАЗДЕЛЯЮЩИХСЯ КООРДИНАТ ДЛЯ СВОБОДНОГО УРАВНЕНИЯ КЛЕЙНА -
ГОРДОНА

А.В. Гайдучик

Научный руководитель: профессор, д.ф.м.н. А.В. Шаповалов
Национальный исследовательский Томский государственный университет,
Россия, г. Томск, пл. Новособорная, 1, 634050
E-mail: gaid.alex.vikt@gmail.com

ANALYSIS OF DEVIDED COORDINATES FOR FREE KLEIN – GORDON EQUATION

A.V. Gaiduchik

Scientific Supervisor: Prof., Dr. A.V. Shapovalov
Tomsk State University, Russia, Tomsk, Novosobornaja square, 1, 634050
E-mail: gaid.alex.vikt@gmail.com

***Abstract.** In the present study, we examined the method of separation of variables in the Klein-Gordon equation, based on full sets of symmetry operators of equation, which was described in papers [1-4]. Separable coordinates presented were analyzed for verification of coordinate transformations with correct inverse formulas determined in the whole space domain of physical variables. Those coordinate systems which do not possess such transformations were modified and the problem of separation of variables was resolved for them. These coordinate systems were called “selected”. Corresponding external electromagnetic fields, which admit separation of variables in the Klein – Gordon equation are presented in the selected coordinate systems. The modified coordinate systems form a two – parametric family. We show that the Maxwell equations for the admissible external fields do not depend on the parameters of coordinate systems. Moreover, we expect that the modified coordinate systems will allow us to examine the problem of completeness of solution basises in separable coordinates.*

Введение. В 1972-74 годах была решена задача разделения переменных в уравнении Клейна-Гордона - в серии работ [1 — 4]. Были найдены все типы внешних электромагнитных полей, задаваемых произвольными функциями, допускающих разделение переменных в уравнении Клейна - Гордона, а также криволинейных координат, в которых это разделение производится. В работах приведено свыше 50 наборов разделяющихся криволинейных координат, и соответственно, столько же типов электромагнитных полей. Задача была решена на основе полных наборов операторов симметрии, допускаемых уравнением. Каждому полному набору операторов симметрии уравнения соответствуют координаты, в которых уравнение допускает разделение переменных, и класс внешних полей (задаваемый произвольными функциями), с которым переменные могут быть поделены. Уравнение Клейна - Гордона в произвольной криволинейной системе координат пишем в следующем виде (подразумеваем суммирование по повторяющимся индексам, если не оговорено другое):

$$(g^{kl}P_kP_l - m^2)\psi = 0 \quad (1)$$

Здесь g^{kl} - метрический тензор, $P_k = i\nabla_k - eA_k$, $k, l = 0, 1, 2, 3$, ∇_k — ковариантная производная по отношению к x^k в пространстве Минковского с метрическим тензором g^{kl} ; A_k - ковариантные

компоненты потенциала электромагнитного поля, e - заряд электрона, i – мнимая единица, m - масса частицы, ψ - волновая функция частицы. В декартовых координатах будем пользоваться метрикой сигнатуры $(+, -, -, -)$ всюду. Всюду используется естественная система единиц $\hbar = c = 1$.

Новизна проблемы. Был проведен анализ приведенных в работах [1—4] криволинейных систем разделяющихся координат. Проверены известные системы разделяющихся координат для свободного уравнения Клейна-Гордона на предмет наличия определенных во всем пространстве физических переменных формул обратной замены. Для наборов операторов симметрии, которым соответствуют разделяющиеся координаты с не соответствующими требованиям формулами обратной замены, задача разделения переменных была решена заново, и найдены модифицированные системы разделяющихся координат, обладающие требуемым качеством. В модифицированных координатах разделение переменных осуществляется во всех областях пространства - времени.

Проиллюстрируем сказанное. Из [1] известны следующие разделяющиеся координаты для свободного ($A_k=0$) уравнения (1) (здесь нижние индексы координат u_i введены для удобства):

$$\begin{aligned} u_0 &= x^1 \\ u_1 &= x^2 \\ u_2 &= \frac{1}{2} \ln \left(\varepsilon \frac{x^0 + x^3}{x^0 - x^3} \right) \\ u_3 &= \sqrt{\varepsilon(x^0)^2 - (x^3)^2}, \end{aligned} \quad (2)$$

Где ε - безразмерный параметр, подбираемый так, чтобы в каждой области пространства – времени формулы (2) были определены. Параметр ε можно выбрать следующей функцией (либо пропорциональной ей с неким положительным коэффициентом):

$$\varepsilon = \text{sign}((x^0)^2 - (x^3)^2) = \text{sign} \left(\frac{x^0 + x^3}{x^0 - x^3} \right) \quad (3)$$

Были вычислены формулы обратной замены к (2). Оказывается, что они зависят от того, в какой области пространства – времени мы вычисляем обратные формулы, и имеет смысл выделить 4 области – см. Рис 1.

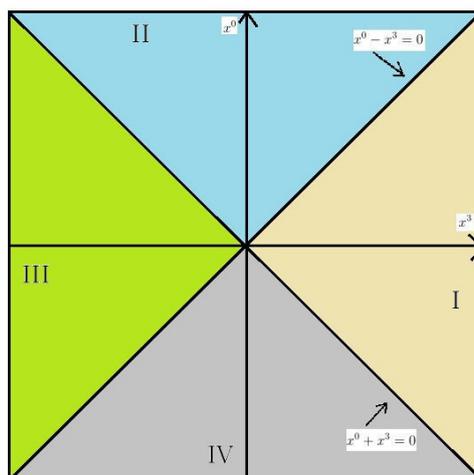


Рис. 1. Области пространства – времени, в которых формулы замены, обратной к (2), различны

При этом получается, например, что в областях I и III параметр (3) принимает одинаковое значение $\varepsilon = -1$, однако формулы обратной замены получаются различными в этих областях, т.е.

параметр не позволяет единообразно записать обратную замену. Аналогичное рассуждение имеет место для областей II и IV. Отсюда следует необходимость модификации систем разделяющихся координат, соответствующих пространственно - подобным и времени - подобным областям пространства-времени. Набор операторов симметрии для свободного уравнения (1), которому в [1] сопоставлены разделяющиеся координаты (2), имеет вид $\{p_1, p_2, L_{30}\}$, где $p_j = i \frac{\partial}{\partial x^j}$, $L_{ij} = x_i p_j - x_j p_i$. Для этого набора задача разделения переменных была решена заново, более общим образом, и получены модифицированные разделяющиеся координаты для свободного уравнения (1):

$$\begin{aligned} u_0 &= x^1, \\ u_1 &= x^2, \\ u_2 &= \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\alpha - \beta x^0 + x^3}{\alpha + \beta x^0 - x^3} \right), \\ u_3 &= \sqrt{\frac{(x^0)^2 - (x^3)^2}{\alpha^2 - \beta^2}}, \end{aligned} \quad (4)$$

где α и β - безразмерные параметры ($\alpha^2 \neq \beta^2$), которые позволяют единообразно написать обратную замену во всех областях I-IV (Рис.1):

$$\begin{aligned} x^3 &= u_3(\alpha \sinh u_2 + \beta \cosh u_2), \\ x^0 &= u_3(\alpha \cosh u_2 + \beta \sinh u_2). \end{aligned}$$

Набор операторов симметрии $\{p_1, p_2, L_{30}\}$ допускает потенциал вида $A_l((x^0)^2 - (x^3)^2)$. Это означает, что оператор уравнения (1) с таким потенциалом по-прежнему будет коммутировать с набором $\{p_1, p_2, L_{30}\}$. Как следствие, по теореме о разделении переменных, приведенной в [1], координаты (2) и (4) – разделяющиеся для уравнения (1) с произвольным потенциалом вида $A_l((x^0)^2 - (x^3)^2)$.

Значение. Модифицированные разделяющиеся координаты (4) позволяют проводить разделение переменных единообразно как в пространственно - подобных областях, так и во времени - подобных. Ожидается, что полученные модифицированные системы координат (4) позволят исследовать проблему полноты для решений уравнения Клейна - Гордона, получающихся в разделенных координатах.

Полученные результаты. Получены искомые системы разделяющихся координат (4) в более общей форме, чем (2). Для класса электромагнитных полей, допускающих разделение переменных в классе модифицированных криволинейных системах координат, получены явные выражения. Выписаны уравнения Максвелла для этих полей в явном виде.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Багров В.Г., Мешков А.Г., Шаповалов В.Н., Шаповалов А.В. Разделение переменных в уравнении Клейна – Гордона I // Известия ВУЗов, Физика. – 1973, Ноябрь.- №11. - стр. 66-72.
2. Багров В.Г., Мешков А.Г., Шаповалов В.Н., Шаповалов А.В. Разделение переменных в уравнении Клейна – Гордона II // Известия ВУЗов, Физика. – 1973, Декабрь.- №12. - стр. 45-52.
3. Багров В.Г., Мешков А.Г., Шаповалов В.Н., Шаповалов А.В. Разделение переменных в уравнении Клейна – Гордона III // Известия ВУЗов, Физика. – 1974, Июнь.- №6. - стр. 74-78.
4. Багров В.Г., Мешков А.Г., Шаповалов В.Н., Шаповалов А.В. Разделение переменных в уравнении Клейна – Гордона IV // Известия ВУЗов, Физика. – 1975, Март.- №3. - стр. 152-154.

**ИЗМЕРЕНИЕ АСИММЕТРИИ ФОТОРОЖДЕНИЯ ОТРИЦАТЕЛЬНО-ЗАРЯЖЕННЫХ ПИОНОВ
ЛИНЕЙНО-ПОЛЯРИЗОВАННЫМИ ФОТОНАМИ НА ТЕНЗОРНО-ПОЛЯРИЗОВАННЫХ
ДЕЙТРОНАХ**

В.В. Гаузштейн, Б.И. Василишин, А.Ю. Логинов

Научный руководитель: д.ф.-м.н. Ю.Ю. Крючков

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: gauzshtein@tpu.ru

**MEASUREMENT OF ASYMMETRY OF PHOTOPRODUCTION OF NEGATIVE-CHARGED
PIONES BY LINEAR-POLARIZED PHOTONS ON TENSOR-POLARIZED DEUTERONS**

V.V. Gauzshtein, B.I. Vasilishin, A.Yu. Loginov

Scientific Supervisor: Prof., Dr. Yu.Yu. Kryuchkov

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: gauzshtein@tpu.ru

***Abstract.** The first results of a double polarization experiment on the determination of the asymmetry of the π -meson photoproduction reaction by a linearly polarized photon on a tensor-polarized deuteron in the virtual photon energy range (300-700 MeV) are presented in the paper. The measurements were performed on the internal tensor-polarized deuterium target of the VEPP-3 electron-positron storage ring at an electron beam energy of 2 GeV. In the experiment, the method of recording two protons and a scattered electron for coincidence was used. The obtained measurement results are compared with the theoretical predictions made in the impulse approximation taking into account the πN and NN rescattering in the final state.*

Введение. В настоящее время большой интерес вызывают двойные поляризационные эксперименты, в которых поляризованный пучок взаимодействует с поляризованной мишенью. Такие эксперименты дают принципиальную возможность измерения т.н. двойных (двухспиновых) поляризационных наблюдаемых. Анализ полученных экспериментальных данных по двойным поляризационным наблюдаемым может дать новую и дополнить существующую информацию о структуре дейтрона и динамике NN -, πN - и πNN -систем на малых расстояниях. В данной работе представлены первые результаты двойного поляризационного эксперимента по выделению асимметрии реакции фоторождения π^- -мезона на тензорно-поляризованном дейтроне линейно-поляризованным квазиреальным фотоном.

Постановка эксперимента. Эксперимент был проведен на электрон-позитронном накопителе ВЭПП-3 с энергией электронного пучка 2 ГэВ. На рис. 1 приведена схема эксперимента. Два плеча основного детектора, регистрирующего два адрона на совпадение, размещались симметрично относительно оси электронного пучка. В каждом плече детектора осуществлялась идентификация протонов, измерение их углов вылета в диапазонах полярных углов $\Delta\theta = (50^\circ - 90^\circ)$ и азимутальных углов $\Delta\varphi = \pm 30^\circ$ относительно медианной плоскости детектирующей системы, измерение энергии

протонов в диапазоне (50 – 200) МэВ с точностью не хуже 10% и определение координат вершины pp -событий с точностью 1 мм. В работе [1] представлено более детальное описание протонных годоскопов и поляризованной дейтериевой мишени. Электроны, рассеянные на 1.6 ± 0.4 градуса регистрировались двумя немагнитными ливневыми детекторами, которые размещались симметрично относительно пучка падающих электронов, и их медианная плоскость совпадала с медианной плоскостью основного детектора. Ливневые детекторы были установлены на вакуумную камеру накопителя на расстоянии 630 мм от центра мишени и обеспечивали эффективную регистрацию электронов с энергией более 1.3 ГэВ в диапазоне углов рассеяния $\theta_e = (1.2^\circ - 2^\circ)$ и $\Delta\phi_e = \pm 30^\circ$.

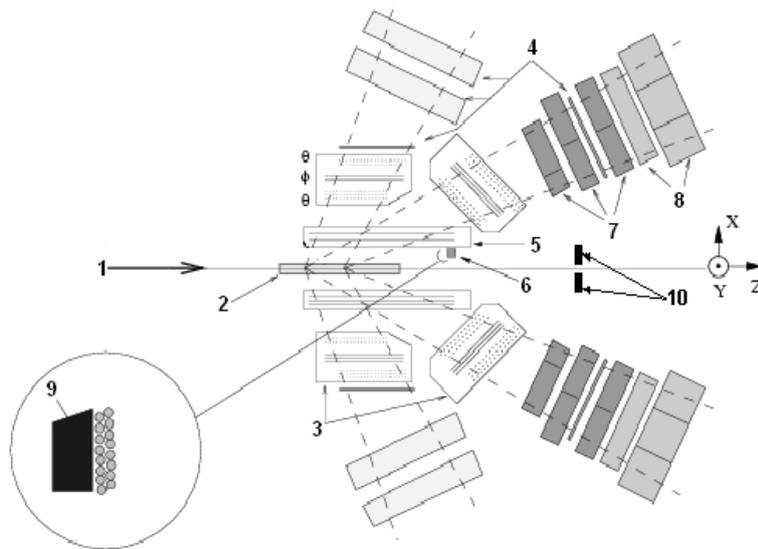


Рис. 1. Схема эксперимента: 1 – электронный пучок, 2 – накопительная ячейка-мишень, 3 – дрейфовые камеры протонных годоскопов, 4 – триггерные сцинтилляционные счетчики, 5 – вершинные дрейфовые камеры, 6 – LQ-поляриметр мишени, 7 – сцинтилляционные детекторы на основе CsI-кристаллов, 8 – сцинтилляционные детекторы на основе NaI-кристаллов, 9 – вольфрамовый конвертер, 10 – электронные ливневые детекторы

Результаты измерений. Результаты эксперимента представлены на рис. 2. На левом графике показана зависимость асимметрии A реакции $\gamma d \rightarrow pp\pi^-$ от энергии фотона E_γ . На правом графике представлена зависимость асимметрии A от инвариантной массы пион-нуклонной подсистемы $M_{p\pi}$. Для каждой точки показана статистическая ошибка и интервал усреднения (по E_γ или по $M_{p\pi}$). В каждом интервале были учтены все имеющиеся экспериментальные события с учетом ограничения некомпланарности на азимутальные углы вылета протонов: $|\phi_2 - \phi_1 - \pi| < 20^\circ$. Суммарная систематическая ошибка не превышает 10%, так что определяющими являются статистические ошибки измерения A .

Асимметрия A зависит (с учетом энергии фотона) от шести кинематических переменных. Экспериментальные точки, приведенные на рис. 2, представляют собой результат усреднения асимметрии A по некоторым шестимерным областям в кинематическом фазовом пространстве. Для прямого сравнения экспериментальных данных и теоретических предсказаний было проведено

статистическое моделирование реакции $\gamma d \rightarrow pp\pi^-$ методом Монте-Карло. В качестве независимых кинематических переменных нами были использованы энергия фотона E_γ , углы вылета двух протонов $\theta_1, \phi_1, \theta_2, \phi_2$ и импульс одного из протонов. Энергетический спектр падающих фотонов, используемый при моделировании, является спектром Далица [2]. Из рис. 2 следует, что наибольшее расхождение между экспериментом и теорией имеется в зависимости асимметрии A от энергии фотона E_γ . В то же время поведение зависимости асимметрии A от инвариантной пион-нуклонной массы $M_{p\pi}$ находится в неплохом согласии с результатом моделирования. Учет взаимодействия в конечном состоянии (пион-нуклонное и нуклон-нуклонное перерасcеяние) в целом приводит к улучшению согласия теории и эксперимента.

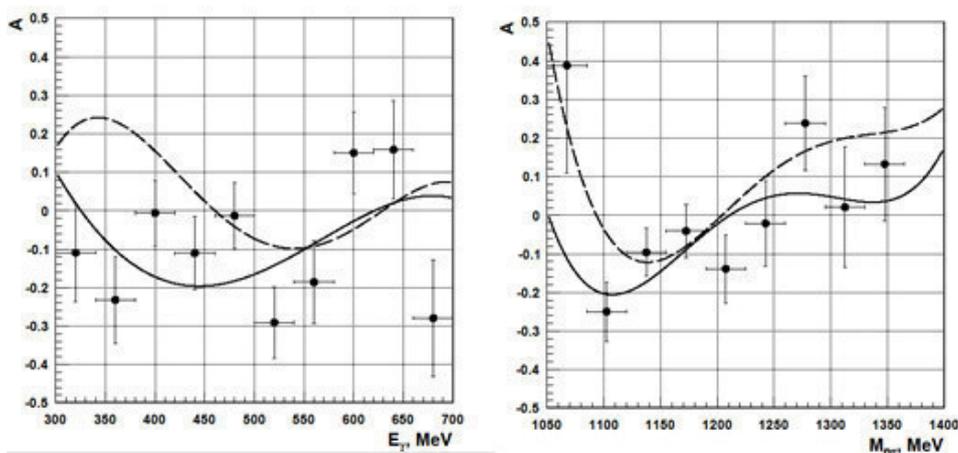


Рис. 2. Зависимость асимметрии A от энергии фотона E_γ и от инвариантной пион-нуклонной массы $M_{p\pi}$. Точки – данные эксперимента, штриховая кривая – результат моделирования реакции в импульсном приближении, сплошная кривая – результат моделирования реакции в импульсном приближении с учетом πN и NN -перерасcеяния в конечном состоянии

В данном эксперименте имелось лишь четыре поляризационных состояния фотонного пучка и дейтронной мишени. Это количество поляризационных состояний позволило нам выделить только асимметрию A , которая представляет собой комбинацию трех поляризационных наблюдаемых T_{21}, Σ и T_{21}^l . Для выделения какой-либо двойной поляризационной наблюдаемой из набора $T_{21}^c, T_{22}^c, T_{20}^l, T_{21}^l, T_{22}^l$ требуется не менее восьми поляризационных состояний фотонного пучка и дейтронной мишени. Это количество поляризационных состояний планируется достичь в будущих двойных поляризационных экспериментах на электрон-позитронном накопителе ВЭПП-3.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №18-32-00013.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Барков Л.М., Гаушштейн В.В., Дмитриев В.Ф. и др. // Известия ВУЗов. Физика. – 2010. – Т. 53. – № 10/2. – С. 25–28.
2. Dalitz R.H. and Yennie D.R. // Phys. Rev. – 1957. – V.105. – P.1598.

**МОРФОЛОГИЯ МИКРОСФЕР ПОЛУЧЕННЫХ
НА ОСНОВЕ АГЛОМЕРИРОВАННЫХ ЧАСТИЦ В ПОТОКЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ ПЛАЗМЫ**

В.В. Шеховцов, О.Г. Волокитин, Р.Е. Гафаров

Научный руководитель: профессор, д.т.н. Г.Г. Волокитин

Томский государственный архитектурно-строительный университет,

Россия, г. Томск, пл. Соляная, 2, 634003

E-mail: shehovcov2010@yandex.ru

**MORPHOLOGY MICROSPHERES OBTAINED
ON THE BASIS AGGLOMERATED PARTICLES IN THE FLOW OF THERMAL PLASMA**

V.V. Shehovcov, O.G. Volokitin, Gafarov R.E.

Scientific Supervisor: Prof., Dr. G.G. Volokitin

Tomsk State University of Architecture and Building, Russia, Tomsk, Sloyanaya sq., 2, 634003

E-mail: shehovcov2010@yandex.ru

***Abstract.** The results of experimental studies preparation microspheres based on agglomerated powders in a thermal plasma flow are carried out in the work. The possibility of using ash and slag wastes as a raw material for the production microspheres by plasma metering has been established. The morphology microspheres obtained is determined from which it is established that there are no defects on the particle surface (cracks, fused particles, pronounced pores). In terms of size and shape, the microspheres obtained are a spherical shape with a diameter of $120 \div 350 \mu\text{m}$ with a bulk density of $0.3-0.4 \text{ g} / \text{cm}^3$.*

На сегодняшний день перспективной областью исследований является формирование полых сферических частиц на основе материалов силикатной группы. Данный тип частиц используется в виде высокоэффективных наполнителей в разных отраслях производства. Силикатные отходы, образованные в процессе деятельности тепловых электростанций являются перспективной сырьевой базой для производства полых микросфер. Однако существует ряд проблем при использовании традиционных источников нагрева при плавлении указанных отходов [1, 2]. Реализуемый традиционными источниками нагрева температурный диапазон не позволяет использовать тугоплавкие силикаты и оксиды для получения полых микросфер, ввиду высокой температуры плавления ($> 2000 \text{ K}$). В работах [3-5] предлагается использовать в качестве источника нагрева частиц энергию термической плазмы. Данный вид энергии может реализовать температуру $3000 \div 5000 \text{ K}$, что позволяет использовать исходное сырье с высокой температурой плавления.

Процесс получения полых микросфер основан на обработке агломерированных порошков в потоке термической плазмы. Внутренняя полость образуется за счет капсулирования некоторой части воздуха находящегося в открытых и закрытых порах агломерата. Контролируя технологические параметры (температуру, скорость несущей среды), возможно получение полых микросфер с заданными геометрическими и эксплуатационными характеристиками.

Для подтверждения описанного процесса проведены экспериментальные исследования, в качестве сырья использовались золошлаковые отходы ГРЭС-1 г. Экибастуз (Республика Казахстан), усредненный оксидный состав представлен в таблице 1.

Таблица 1

Химический состав золошлаковых отходов ГРЭС-1 г. Экибастуз

Сырьевые материалы		Содержание оксида, мас. %						
		SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	CaO	MgO	Na ₂ O	K ₂ O
Зола ГРЭС-1 г. Экибастуз	усредн.	55,85	25,45	5,65	1,17	0,8	1,95	0,42

Изменения минералогического состава, происходящего в сырье во время нагрева целесообразно проследить по диаграммам состояния. Найден путь кристаллизации расплава полученного на основе используемого сырья (рис. 1, а), который расположен в элементарном треугольнике S – CaS₂ – Al₂S₃.

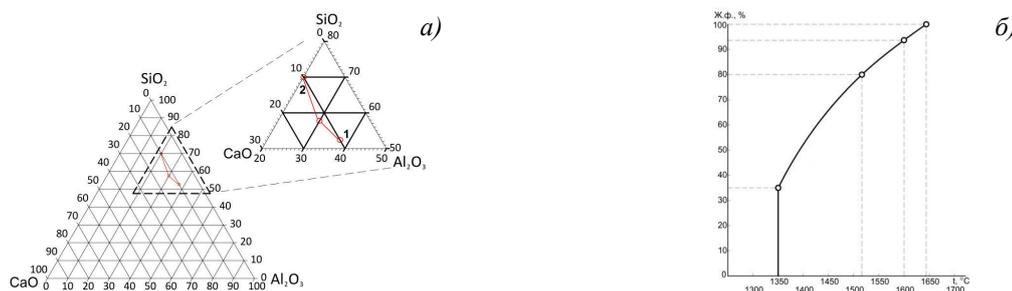


Рис. 1. а) Путь кристаллизации расплава золошлаковых отходов на диаграмме состояния в системе CaO–Al₂O₃–SiO₂; б) Кривая плавкости с учетом химического состава золошлаковых отходов.

Используемое сырье находится на участке диаграммы примыкающем к стороне SiO₂ – Al₂O₃ и располагается в элементарном треугольнике S – CaS₂ – Al₂S₃, в поле кристаллизации муллита. То есть при охлаждении расплава, начиная с температуры 1640 °С выпадают кристаллы муллита (точка 1). Начиная с температуры 1540 °С, совместно выпадают кристаллы муллита и анортита. В точке тройной эвтектики выпадут кристаллы кварцевых соединений, и кристаллизация при 1345 °С полностью закончится. То есть при нагревании частиц до температуры 1345 °С появляется жидкая фаза за счет плавления тройной эвтектики. Далее с повышением температуры расплавляются кварцевые соединения и постепенно плавятся кристаллы алюмосиликатов. В точке 2 путь плавления заканчивается – все кристаллы расплавятся. Изменение при этом количества жидкой фазы в сырьевых материалах при увеличении температурных характеристик можно проследить по кривой плавкости (рис. 1, б).

Термическая обработка приготовленного агломерированного порошка производилась на электроплазменном стенде [6-9]. В процессе проведения экспериментов установлен рациональный режим обработки агломерированного порошка: мощность плазменного генератора P=35 кВт; расход плазмообразующего газа (воздух) G_г=0,4 г/с; расход сырья G_{сыр}=4,7 кг/ч.

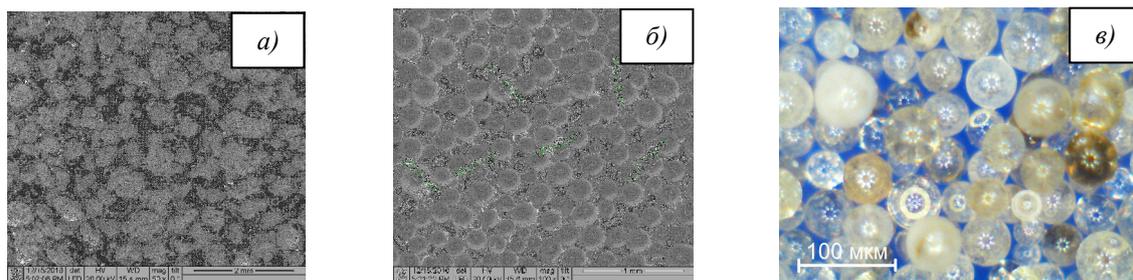


Рис. 2. Морфология агломерированных частиц (а) и полученные микросферы на их основе (б, в).

Об эффективности плазменного воздействия на агломерированные частицы можно судить по степени сфероидизации. На рисунке 2, а представлены снимки сканирующей электронной микроскопии агломерированных частиц на основе золошлаковых отходов, размер частиц находится в диапазоне 80÷250 мкм. Морфология частиц представлена совокупностью гетеродисперстных частиц неправильной формы, присутствует развитая система микропор. По результатам эксперимента получены микросферы с объемной плотностью $0,3\div 0,4$ г/см³. Полученные микросферы (рис. 2, б, в) характеризуются высокой степенью сферичности, диаметр частиц варьируется 120÷350 мкм. На поверхности частиц отсутствуют дефекты (трещины, припавленные частицы, ярко выраженные поры) присущие микросферам полученных традиционным путем на тепловых электростанциях. Некоторые частицы полностью прозрачны (особенно малого размера). Цвет может меняться от белого до желтого или коричневого. Различные цвета зависят от содержания микроэлементов в сырье Fe, Ti или Cu (рис. 2, в).

В результате проведенных экспериментов установлена возможность использования золошлаковых отходов ГРЭС-1 г. Экибастуз в виде исходного сырья для получения микросфер плазменным методом. Рассмотрена морфология полученных микросфер из которой установлено, что на поверхности частиц отсутствуют дефекты (трещины, припавленные частицы, ярко выраженные поры). Полученные микросферы обладают сферической формой с диаметром 120÷350 мкм; с насыпной плотностью $0,3\div 0,4$ г/см³. Более мелкие частицы в основном прозрачные, в то время как более крупные частицы непрозрачные и имеют различные оттенки.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Делицын Л. М., Власов А. С. Необходимость новых подходов к использованию золы угольных ТЭС // Теплоэнергетика. – 2010. – № 4. – С. 49–55.
2. Минько Н. И., Бессмертный В. С., Дюмина П. С. Использование альтернативных источников энергии в технологии стекла и стеклокристаллических материалов // Стекло и керамика. – 2002. – Т. 59, № 3. – С. 77–79.
3. Arkhipov V.A., Kozlov E.A., Zharova I.K., Titov S.S., Usanina A.S. Evolution of liquid-drop aerosol cloud in the atmosphere // Arabian Journal of Geosciences. V. 9, No. 2. 2016. P. 1–10.
4. Gulyaev I. Experience in plasma production of hollow ceramic microspheres with required wall thickness // Ceramics International. 2015. V. 41. No. 1. P. 101-107.
5. Шеховцов В.В., Волокитин О.Г. Технология получения микросфер различной структуры на основе золошлаковых отходов плазменным методом // Техника и технология силикатов. – 2017. Т. 24. – № 3. – С. 2-6.
6. Шеховцов В.В., Волокитин О.Г., Волокитин Г.Г., Скрипникова Н.К., Аньшаков А.С., Кузьмин В.И. Влияние термической плазмы на образование керамических микросфер. Часть 1. Характер нагрева и испарения // Вестник Томского государственного архитектурно-строительного университета. – 2017. Т. 64. – № 5. С. 143-150.
7. Шеховцов В.В., Власов В.А., Волокитин Г.Г., Волокитин О.Г. Использование низкотемпературной плазмы для получения зольных микросфер // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2016. Т. 59. – № 9-3. – С. 305-308.
8. Волокитин О.Г., Верещагин В.И., Волокитин Г.Г., Скрипникова Н.К., Шеховцов В.В. Анализ процессов традиционного и плазменного плавления золы ТЭЦ // Техника и технология силикатов. – 2016. Т. 23. – № 3. – С. 2-5.
9. Волокитин Г.Г., Шеховцов В.В., Скрипникова Н.К., Волокитин О.Г., Волланд С. Физико-химические процессы получения зольных микросфер с использованием низкотемпературной плазмы // Вестник Томского государственного архитектурно-строительного университета. – 2016. Т. 56. – № 3. – С. 139–145.

ИССЛЕДОВАНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛЫ H_2S В
ПОЛОСЕ ν_2 : АНАЛИЗ ПОЛОЖЕНИЯ ЛИНИЙ, ИНТЕНСИВНОСТИ, ПОЛУШИРИНЫП.А. Глушков

Научный руководитель: О.Н. Улеников

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: pag14@tpu.ruSTUDY OF THE RO-VIBRATIONAL STRUCTURE OF H_2S MOLECULES IN THE BAND ν_2 :
ANALYSIS OF LINE POSITIONS, INTENSITIES AND HALF-WIDTHSA.G.Ziatkova

Scientific Supervisor: Prof., Dr. E.S. Bekhtereva

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: pag14@tpu.ru

Abstract. Spectroscopic study of hydrogen sulfide is important, both for replenishing databases used in astrophysics and for fundamental knowledge about the molecule: predictions of its physic-chemical properties. A study of the H_2S molecule in the ν_2 region was carried out, analysis of line positions, intensities and half-width.

Цель работы: исследование количественных характеристик линий колебательно-вращательного спектра поглощения полосы ν_2 и решение обратных спектроскопических задач для молекулы H_2S .

Задачи, поставленные для достижения цели:

1. Выполнить интерпретацию спектра высокого разрешения молекулы H_2S , полосы ν_2 (диапазон $650 - 2200 \text{ см}^{-1}$);
2. Определить количественные значения коэффициентов поглощения для колебательно-вращательных переходов в полосе ν_2 .
3. Решить обратную спектроскопическую задачу и определить параметры эффективного гамильтониана для колебательного состояния (010).
4. Определить параметры эффективного дипольного момента для полосы ν_2 .

Материалы и методы. Экспериментальные спектры молекулы H_2S были зарегистрированы в техническом университете Брауншвейга, Германия, на Фурье-спектрометре высокого разрешения Bruker-125 HR. Экспериментальные условия представлены в таблице 1.

Таблица 1

Экспериментальные условия регистрации спектров молекулы H_2S .

Спектр	Диапазон, см^{-1}	Давление, мбар	Длина пути, м	Разрешение, см^{-1}	Число сканов	Температура, К
I	600-5000	2,0	4	0,003	1210	300
II	600-2200	1,5	163	0,0016	330	300
III	600-2200	4,5	163	0,003	1960	300

Методом, позволяющим выполнить интерпретацию спектра, является метод комбинационных разностей (GSCD). Основу метода составляет правило разностей частот переходов на возбужденный уровень колебательно-вращательного состояния. Полученные таким образом разности должны с

точностью, определяющей положение линии в исследуемом спектре, совпадать с разностями соответствующих уровней в основном состоянии см. рис.2. Нами было использовано основное состояние для молекулы H_2S из работы [4]. Всего более 800 переходов были отнесены к полосе ν_2 . Это позволило определить 182 колебательно-вращательные энергии состояния (010) со значениями $J^{\max}=25$ $K_a^{\max}=15$. Полученные уровни были вовлечены в обратную спектроскопическую задачу с использованием модели эффективного гамильтониана Уотсона (см., например, [1-3]).

Модель эффективного вращательного оператора. Объектом исследования в данной работе является спектр молекулы сероводорода H_2S , группа молекулярной симметрии которой изоморфна точечной группе C_{2v} . Это легкая молекула типа ассимметричного волчка, у которой три вращательные постоянные существенно различны, что позволяет использовать эффективный вращательный гамильтониан в A редукции и I' представлении, которому соответствует система координатных осей на рис. 3, обозначенных штрихами.

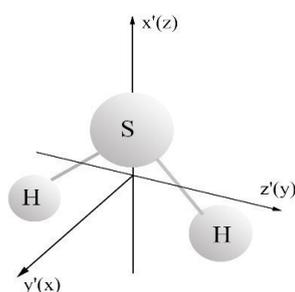


Рис. 3. Молекула сероводорода H_2S в системе молекулярно-фиксированных осей. Оси, обозначенные штрихами, соответствуют I' представлению

Эффективный гамильтониан Уотсона имеет вид:

$$\begin{aligned}
 H^{v\nu} = & E^v + \left[A^v - \frac{1}{2}(B^v + C^v) \right] J_z^2 + \frac{1}{2}(B^v + C^v) J^2 + \frac{1}{2}(B^v + C^v) J_{xy}^2 - \Delta_K^v J_z^4 - \Delta_{JK}^v J_z^2 J^2 - \Delta_J^v J^2 \\
 & - \delta_K^v [J_z^2, J_{xy}^2]_{\pm} - 2\delta_J^v J^2 J_{xy}^2 + H_K^v J_z^6 + H_{KJ}^v J_z^4 J^2 + H_{JK}^v J_z^2 J^4 + H_J^v J^6 + [h_K^v J_z^4 + h_{JK}^v J_z^2 J^2 + h_J^v J^4, J_{xy}^2]_{\pm} \\
 & + L_K^v J_z^8 + L_{KKJ}^v J_z^6 J^2 + L_{JK}^v J_z^4 J^4 + L_{JJK}^v J_z^2 J^6 + L_J^v J_z^8 + [J_K^v J_z^6 + J_{KJ}^v J_z^4 J^2 + J_{JK}^v J_z^2 J^4 + J_J^v J^6, J_{xy}^2]_{\pm} \\
 & + P_K^v J_z^{10} + P_{KKJ}^v J_z^8 J^2 + P_{KJ}^v J_z^6 J^4 + P_{JK}^v J_z^4 J^6 + S_K^v J_z^{12} + S_{KKJ}^v J_z^{10} J^2 + \dots, \quad (1)
 \end{aligned}$$

где J_{α} [$\alpha=x,y,z$]- компоненты углового момента в системе координат, связанной с молекулой;

A^v, B^v, C^v - эффективные вращательные постоянные, связанные с колебательными состояниями (ν);

E – центр полосы; $\Delta_K^v, \Delta_{JK}^v, \Delta_J^v$ и т.д. - параметры центробежного искажения разного порядка малости.

Вариационная процедура, позволяющая определить спектроскопические параметры, приведенные в таблице 2, основана на методе наименьших квадратов.

В решение обратной спектроскопической задачи были вовлечены 182 уровня энергии. Число варьируемых параметров составило 21. Полученные параметры с 1σ -доверительными интервалами приведены в таблице 2. Параметры центробежного искажения более высоких порядков были фиксированы значениям из работы [1]. Среднеквадратичное воспроизведение составило $d_{rms}=0,00019\text{см}^{-1}$.

Таблица 2

Параметры эффективного гамильтониана состояния (010) молекулы H₂S

Параметр	Значение, см ⁻¹	Параметр	Значение, см ⁻¹	Параметр	Значение, см ⁻¹
E	1182.576355(70)	$H_K \times 10^5$	0.2486(24)	$L_{KJJ} \times 10^8$	0.1490(22)
A	10.722067(17)	$H_{KJ} \times 10^5$	0.1051(17)	$L_J \times 10^8$	0.021621(25)
B	9.224454(11)	$H_{JK} \times 10^5$	-0.18331(66)	$\delta_K \times 10^3$	-0.01761(19)
C	4.6688479(43)	$H_J \times 10^5$	0.037502(75)	$\delta_J \times 10^3$	0.347358(64)
$\Delta_K \times 10^2$	0.45540(11)	$L_K \times 10^8$	-0.912(21)	$h_K \times 10^6$	2.1523(23)
$\Delta_{KJ} \times 10^2$	-0.273286(57)	$L_{KKJ} \times 10^8$	1.300(24)	$h_{KJ} \times 10^6$	-0.6050(16)
$\Delta_J \times 10^2$	0.075613(13)	$L_{KJ} \times 10^8$	-0.698(11)	$h_J \times 10^6$	0.18721(38)

Исследование интенсивностей. Количественное определение коэффициентов поглощения выполнялось на основе использования Хартманн-Гран контура [5]. Модель эффективного оператора дипольного момента была взята из работы [6].

Таблица 3

Параметры дипольного момента для полосы ν_2 молекулы H₂S. Единицы измерения - Дебай (D)

Параметр	Значение, D	Параметр	Значение, D
$\mu_1 \times 10$	0,32944(14)	$\mu_4 \times 10^2$	0,3544(57)
$\mu_2 \times 10^4$	0,139(30)	$\mu_6 \times 10^4$	0,344(48)

Среднеквадратичное отклонение для интенсивностей 150 линий при описании 4 параметрами составило 4,2%.

Заключение. В работе проведено исследование спектральных характеристик колебательно-вращательной полосы поглощения ν_2 молекулы H₂S. Решены обратные спектроскопические задачи для энергетических характеристик и дипольного момента. Полученная информация может быть использована для пополнения спектроскопических баз данных.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. O.N. Ulenikov, A.B. Malikova, High Resolution Vibrational-Rotational Spectrum of H₂S in the Region of the ν_2 Fundamental Band // Journal of Molecular Spectroscopy. – 1996. – № 176. – С. 229–235.
2. O.N. Ulenikov, A.-W. Liu, E.S. Bekhtereva, O.V. Gromova, L.-Y. Hao, and S.-M. Hu, On the study of high-resolution rovibrational spectrum of H₂S in the region of 7300-7900cm⁻¹// Journal of Molecular Spectroscopy. – 2004. – № 226. – С. 57–70
3. O.N. Ulenikov, G.A. Onopenko, M. Koivusaari, S. Alanko and R. Anttila, High Resolution Fourier Transform Spectrum of H₂S in the 3300-4080 cm⁻¹ Region// Journal of Molecular Spectroscopy. – 1996. – № 176. – С. 236–250
4. J.-M. Flaud, C.Camy-Peyret, J.W.C. Johns, The far-infrared spectrum of hydrogen sulfide. The (000) constants of H₂³²S, H₂³³S, and H₂³⁴S// Can. J. Phys. – 1983. - № 61. – С. 1462–1473.
5. J. Tennyson, P. F. Bernath, et all, Recommended isolated-line profile for representing high-resolution spectroscopic transitions (IUPAC Technical Report)// Pure Appl. Chem.-2014. - № 86(12). – С.1931–1943.
6. J. M. Flaud , C.Camy-Peyret, Vibration-rotation intensities in H₂O-type molecules application to the $2\nu_2-\nu_2$, ν_1 , and ν_3 Bands of H₂¹⁶O // J. Molec. Spectrosc. – 1975. - № 55. – С. 278–310.

**ОСОБЕННОСТИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ УДАРНОЙ ВОЛНЫ ЧАСТИЦ С УЧЁТОМ ИХ
ОБЪЕМНОЙ ДОЛИ**

Н.В. Гольдина

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. Л.Л. Миньков
Национальный исследовательский Томский государственный университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050
E-mail: alche0809@mail.ru

**PECULIARITIES OF A NUMERICAL SOLUTION OF THE PROBLEM OF SHOCK WAVE
PROPAGATION OVER GAS-PARTICLE SUSPENSION CONSIDERING THE VOLUME FRACTION**

N.V. Goldina

Scientific Supervisor: Prof., Dr. L.L. Minkov
Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050
E-mail: alche0809@mail.ru

***Abstract.** Numerical solution of the one-dimensional problem of shock wave propagation over gas-particle suspension considering the volume fraction is obtained. The solution is found using the approach of interpenetrating continua. Impact of particle volume fraction to the shock wave propagation is shown. Comparison of numerical solutions taking into account the volume fraction and without that for the problem is discussed.*

Введение. На протяжении многих лет человечество сталкивалось с катастрофами, связанными со взрывами. Физические процессы, возникающие при подобных чрезвычайных ситуациях, необходимо моделировать, чтобы предотвращать их. Рассмотрение задач о распространении детонационных волн является актуальным на сегодняшний день. Поэтому возникает необходимость исследования поведения ударных волн в газодисперсных средах. Проведение экспериментов является затратным и опасным, поэтому численное моделирование позволяет без угрозы для жизни человека и окружающей среды проводить исследования, а в связи с развитием современной вычислительной техники еще и с необходимой степенью точности. Анализ результатов моделирования таких задач даёт возможность оценить проблемы взрывов на производствах, помещения которых склонны к запылению, и в местах добычи полезных ископаемых, в том числе и угля, как закрытым, так и открытым способами. Моделирование проводится с получением решения системы уравнений Эйлера, которое описывает течение газозвеси. Численно её можно решить, прибегая к приближенным методам, основанным на разностных схемах типа Годунова [1]. Целью данной научно-исследовательской работы является численное моделирование распространения ударной волны в газодисперсной среде с учётом объемной доли частиц.

Постановка задачи. Имеется замкнутый объем, состоящий из двух областей, разделенных перегородкой. Слева от перегородки сосредоточены частицы. Рассматривается одномерная задача о распаде произвольного разрыва в газозвеси с твёрдыми частицами в замкнутом объеме после того, как в начальный момент времени перегородка убирается. Учитывается объёмная доля частиц. Также вводятся

следующие допущения для решения данной задачи: 1) газ идеальный и химический не реагирующий; 2) частицы представляют собой сферы одного радиуса; 3) столкновения частиц не учитывается; 4) давление создается только газом; 5) фазовые переходы между газовой и дисперсной фазами отсутствуют.

Если ввести масштабы плотности – ρ_* , скорости – u_* , длины – x_* , а масштабы времени, давления и температуры определить как: $t_* = x_*/u_*$, $P_* = \rho_* u_*^2$, $T_* = u_*^2/C_b$, то безразмерная система уравнений, описывающая течение газодисперсной среды в рамках вышеупомянутых допущений (с учетом скоростного и температурного отставания частиц от газа), принимает вид:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = \mathbf{G}, \quad (1)$$

где

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho \cdot u \\ \rho \cdot E \\ \rho_s \\ \rho_s \cdot u_s \\ \rho_s \cdot E_s \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{bmatrix} \rho \cdot u \\ p + \rho \cdot u^2 \\ \rho \cdot u \cdot E \\ \rho_s \cdot u_s \\ \rho_s \cdot u_s^2 \\ \rho_s \cdot u_s \cdot E_s \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{G} = \mathbf{G}_1 + \mathbf{G}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ \rho_s \cdot \varphi_f \cdot (u_s - u) \\ \rho_s \cdot \varphi_q \cdot (T_s - T) + \rho_s \cdot u_s \cdot \varphi_f \cdot (u_s - u) \\ 0 \\ \rho_s \cdot \varphi_f \cdot (u - u_s) \\ \rho_s \cdot \varphi_q \cdot (T - T_s) + \rho_s \cdot u_s \cdot \varphi_f \cdot (u - u_s) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ \alpha \cdot \frac{\partial p}{\partial x} \\ \frac{\partial(\alpha \cdot p \cdot u)}{\partial x} - p \cdot \frac{\partial(\alpha \cdot u)}{\partial x} \\ 0 \\ -\alpha \cdot \frac{\partial p}{\partial x} \\ -\frac{\partial(\alpha \cdot p \cdot u_s)}{\partial x} + p \cdot \frac{\partial(\alpha \cdot u_s)}{\partial x} \end{bmatrix},$$

E – полная энергия газа, $E = \frac{C_v}{C_b} T + \frac{u^2}{2}$; E_s – полная энергия частиц, $E_s = T_s + \frac{u_s^2}{2}$; φ_f – обратное время

динамической релаксации частицы, $\varphi_f = \frac{18 \cdot \mu \cdot f_d}{d^2 \cdot \rho_{ss}}$; φ_q – обратное время тепловой релаксации частицы,

$\varphi_q = \frac{Nu \cdot \lambda \cdot \varphi_f}{3 \cdot \mu \cdot C_b \cdot f_d}$; d – размер частиц, μ – коэффициент динамической вязкости газа; λ – коэффициент

теплопроводности газа; C_v – удельная теплоемкость газа при постоянном объеме; C_b – удельная теплоемкость частиц; u – скорость, ρ – плотность; p – давление; T – температура; параметры с индексом s относятся к дисперсной фазе; f_d – функция взаимодействия, которая учитывает влияние эффектов

сжимаемости и инерционности на силу сопротивления частицы; R_d – радиус частиц, $R_d = 3 \sqrt{\frac{\rho_s}{n_s}}$; α –

объемная доля частиц, $\alpha = \rho_s / \rho_{0s}$. Значения \mathbf{G}_1 соответствуют учёту взаимодействия между газом и частицами, а значения \mathbf{G}_2 – объемной доле частиц.

Метод решения. Для численного решения системы уравнений (1) был использован метод конечных объемов, основанный на вычислении потоков консервативных переменных на границах конечно-разностных ячеек. Потоки \mathbf{F} на гранях ячеек для газа найдены по методу Ван Лира [2,3], а для

потоков частиц использовался метод Крайко для решения задачи распада разрыва в среде лишённой собственного давления [4]. Потоки вектора \mathbf{G} выражены через верхний временной слой, кроме слагаемых, содержащих в себе объемную долю α . Разностная схема в таком случае выглядит следующим образом:

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\tau}{h}(F_{i+1/2} - F_{i-1/2}) + \tau \cdot (G_{1i}^{n+1} + G_{2i}^n),$$

где параметрам в центрах ячеек присвоены целые индексы i , а параметрам на гранях ячеек – полуцелые индексы $i+1/2$ и $i-1/2$, τ – шаг по времени, h – шаг по пространству.

Выводы. В ходе исследования была численно решена система уравнений (1), описывающая одномерное течение газодисперсной среды по слою частиц с учётом их объемной доли. Получены численные результаты для параметров газа и частиц. Исследовано влияние объемной доли на поведение распространения ударной волны. Приведено сравнение результатов, полученных для данной задачи и аналогичной ей без учёта объемной доли, где рассматривается влияние на поведение частиц массовой доли.

Исследование выполнено за счёт гранта РНФ (проект No. 17-79-20011).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Нигматулин Р.И. Динамика многофазных сред. Ч. 1. – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1987. – 464 с.
2. Van Leer B. Flux-Vector Splitting for the Euler Equation // Lecture Notes in Physics. 1982. V.170. P.507–512.
3. Toro E. F. Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics. London New York: Springer–Verlag Berlin Heidelberg, 2009.
4. Крайко А.Н. О поверхностях разрыва в среде, лишённой собственного давления // Прикладная математика и механика. – 1979. – Т.43. – №3. – С. 500–510.

**О ВЛИЯНИИ УСЛОВИЙ ОСАЖДЕНИЯ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
КРЕМНИЙ-УГЛЕРОДНЫХ ПЛЁНОК**А.С. Гренадёр

Научный руководитель: доцент, к.т.н., А.А. Соловьёв

Институт сильноточной электроники СО РАН,

Россия, г. Томск, пр. Академический 2/3, 634055

E-mail: 1711Sasha@mail.ru**ABOUT INFLUENCE OF DEPOSITION CONDITIONS ON MECHANICAL AND OPTICAL
PROPERTIES OF SILICON-CARBON FILMS**A.S. Grenadyorov

Scientific Supervisor: PhD, A.A. Soloviev

INCE SB RAS, Russia, Tomsk, 2/3 Akademicheskoy Avenue, 634055

E-mail: 1711Sasha@mail.ru

***Abstract.** The a-C:H:SiO_x films was deposited on glass substrates by plasma-assisted chemical vapor deposition combined with pulsed bipolar substrate bias from mixtures of argon and polyphenylmethylsiloxane vapor. Optical properties of a-C:H:SiO_x films were investigated and studied using the transmission spectrum $T(\lambda)$ in visible range 300–800 nm. It is shown that integrated transparency of a-C:H:SiO_x films in visible range from 380–780 nm is 70–89%, band gap is 2,3–2,6 eV, band tail width or Urbach energy is 547–718 meV depend on deposition conditions.*

Введение. На сегодняшний день при создании оптических систем и ИК-оборудования требуется обеспечить одновременно защиту и просветление оптических элементов в требуемом диапазоне длин волн. Для решения этой задачи хорошо подходят алмазоподобные (a-C:H, DLC) покрытия, обладающие высокой твердостью и прозрачностью, высоким коэффициентом поглощения и химической стойкостью. Применение алмазоподобных углеродных покрытий для просветления оптики в ИК-диапазоне длин волн ограничивается высокими остаточными (внутренними) напряжениями (> 6 ГПа) в пленке [1-3], которые не позволяют сформировать плёнки толщиной более 1 мкм вследствие их разрушения. Для минимизации остаточных напряжений необходимо использовать отжиг при высокой температуре >400 °С, но не все подложки можно подвергать нагреву. В связи с этим требуется метод, обеспечивающий формирование оптических покрытий с низкими внутренними напряжениями при низкой температуре подложки.

Кремний-углеродные пленки, формируемые из плазмы несамостоятельного дугового разряда с накаливаемым катодом, обладают низкими внутренними напряжениями (менее 1 ГПа), не подвержены графитизации и при этом обладают всеми достоинствами DLC [4, 5].

Данная работа посвящена исследованию влияния рабочего давления аргона p_{Ar} и биполярного напряжения смещения U_{bias} на оптические и механические свойства полученных пленок.

Материалы и методы исследования. Кремний-углеродные пленки осаждались на подложки стекла толщиной 1,2 мм. Для осаждения кремний-углеродных пленок использовалась вакуумная установка с турбомолекулярной откачкой, оснащенная плазмогенератором с накаливаемым катодом,

работающем в парах полифенилметилсилоксана (ПФМС). Подробнее метод осаждения и экспериментальное оборудование описаны в [6]. Подложки крепились на проводящий держатель образцов, расположенный на расстоянии 300 мм от плазмогенератора. Перед осаждением пленок производилась очистка подложек ионами аргона в течение 6 минут. В этом случае рабочее давление аргона составляло $2,8 \cdot 10^{-1}$ Па, а на подложку подавалось биполярное напряжение смещения с амплитудой отрицательного импульса 650 В, частотой следования импульсов 100 кГц, амплитудой положительного импульса – 15–20% от величины отрицательного импульса и длительностью положительного импульса 4 мкс.

Было проведено 2 серии экспериментов: 1) с различным p_{Ar} в вакуумной камере и 2) с различным U_{bias} , прикладываемым к подложке. Были обработаны и проанализированы результаты ИК-Фурье и Раман спектроскопии, атомно-силовой микроскопии и спектров пропускания пленок.

Результаты. Из таблицы 1 можно видеть, что как p_{Ar} , так и U_{bias} оказывают положительное влияние на повышение твердости и снижение скорости роста кремний-углеродных пленок. Прирост твердости, обусловлен повышением содержания sp^3 гибридных атомов углерода в пленке, что подтверждается результатами Раман и ИК-Фурье спектроскопии.

Таблица 1

Влияние p_{Ar} и U_{bias} на механические свойства и скорость роста кремний-углеродных пленок

p_{Ar} (Па)	U_{bias} (В)	H (ГПа)	E (ГПа)	ν (нм/мин)
$2,5 \cdot 10^{-2}$	-100	3,3	35,8	39,8
$9 \cdot 10^{-2}$		4,7	50,2	26,2
$2 \cdot 10^{-1}$		6,9	71,3	16,5
$2,8 \cdot 10^{-1}$		9,8	87,7	14,4
$2,5 \cdot 10^{-2}$	-100	3,3	35,8	39,8
	-200	5,8	52,7	25,5
	-300	9,8	94,9	24
	-500	11,8	111,6	20,5
	-650	13,6	121,7	20

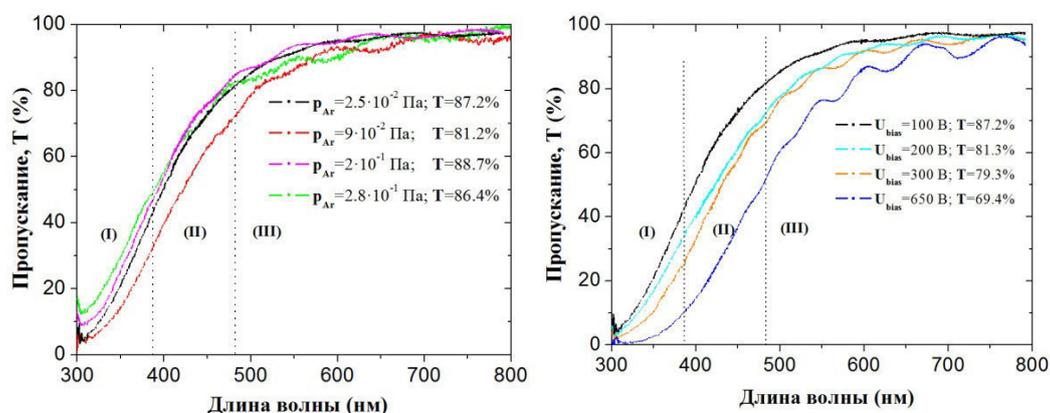


Рис. 1. Спектры пропускания кремний-углеродных пленок, полученных при различном p_{Ar} (слева) и различных U_{bias} (справа)

На рисунке 1 представлены спектры пропускания полученных кремний-углеродных пленок при различных p_{Ar} (слева) и различных U_{bias} (справа). Интегральное пропускание полученных пленок в видимом диапазоне длин волн 380–780 нм составляет не менее 80%. Явной зависимости от p_{Ar} не наблюдается, а при увеличении U_{bias} происходит снижение пропускной способности с 87 до 69%.

Таблица 2

Оптические характеристики кремний-углеродных пленок

№ п.п.	p_{Ar} (Па)	U_{bias} (В)	$\lambda_{cut-off}$ (nm)	E_g (n=2) (eV)	E_U (meV)
1	$2,5 \cdot 10^{-2}$	-100	477	2,6	547
2	$9 \cdot 10^{-2}$	-100	512	2,4	585
3	$2 \cdot 10^{-1}$	-100	488	2,5	608
4	$2,8 \cdot 10^{-1}$	-100	504	2,4	634
5	$2,5 \cdot 10^{-2}$	-100	477	2,6	547
6	$2,5 \cdot 10^{-2}$	-200	496	2,5	585
7	$2,5 \cdot 10^{-2}$	-300	510	2,4	621
8	$2,5 \cdot 10^{-2}$	-650	537	2,3	730

Заключение. В процессе научных исследований было установлено, что увеличение рабочего давления аргона от $2,5 \cdot 10^{-2}$ до $2,8 \cdot 10^{-1}$ Па приводит к повышению твердости, модуля упругости, энергии Урбаха кремний-углеродных плёнок с 3.3 до 9.8 ГПа, с 35.8 до 87.7 ГПа, с 547 до 634 мэВ, соответственно, при толщине пленки 1000 ± 200 нм.

Повышение амплитуды отрицательного импульса биполярного напряжения смещения в диапазоне 100–650 В способствует повышению твердости, модуля упругости, критической длины волны, энергии Урбаха кремний-углеродных пленок с 3.3 до 13.6 ГПа, с 35.8 до 121.7 ГПа, с 476 до 536 нм, с 547 до 718 мэВ, соответственно, а оптическая ширина запрещенной зоны и интегральная прозрачность в диапазоне длин волн 380–780 нм снижается с 2.6 до 2.31 эВ и с 87 до 69%, соответственно при толщине пленки 1000 ± 200 нм.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Paul R., Bhattacharyya S., Bhar R., Pal A. Modulating of Residual Stress in Diamond-like Carbon Films with Incorporation of Nanocrystalline Gold // Applied Surface Science. – 2011. – V. 257. – P. 10451-10458.
2. Yue W., Gao X., Wang C. et al Microstructure and Friction Reducing Performance of Sulfurized W Doped Diamond-like Carbon Film // Materials Letters. – 2012. – V. 73. – P. 202-205.
3. Mangolini F., Rose F., Hilbert J. et al Thermally induced evolution of hydrogenated amorphous carbon // Applied Physics Letters. – 2013. – V. 103. – P. 161605-1 – 161605-5.
4. Choi H. W., Moon M.-W., Kim T.-Y. et al The Thermal Annealing Effect on The Residual Stress and Mechanical Property in the Compressive Stressed DLC Film // Materials Science Forum. – 2005. – V. 475-479. – P. 3619-3622.
5. Randeniya L.K., Bendavis A., Martin P.J. et al Molecular structure of SiO_x-incorporated diamond-like carbon films; evidence for phase segregation // Diamond & Related Materials. – 2009. – V. 18. – P. 1167-1173.
6. Гренадёр А.С., Оскомов К.В., Соловьёв А.А., Работкин С.В. Осаждение кремний-углеродных покрытий из плазмы несамостоятельного дугового разряда с накальным катодом // Журнал технической физики. – 2016. – Т. 86. – вып. 5. – С. 51-56.

**ДИФфуЗИОННЫЕ БАРЬЕРЫ ДЛЯ ВОДОРОДА В ПАЛЛАДИИ:
РАСЧЁТЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ**

Е. Даньдань

Научный руководитель: Л.А. Святкин

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: 710170246@qq.com

**DIFFUSION BARRIERS OF HYDROGEN IN PALLADIUM:
CALCULATIONS FROM THE FIRST PRINCIPLES**

Ye. Dandan

Scientific Supervisor: L.A. Svyatkin

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: 710170246@qq.com

***Abstract.** The purpose of this study is calculating diffusion barriers of the Pd-H system at different ratios of hydrogen and palladium atoms. The minimal diffusion barriers correspond to the transition of the hydrogen atom from the tetrahedral interstitial to the octahedral and back (~ 0,16 and 0,39 eV, respectively). According to the results of calculations in equilibrium, hydrogen is located in the o-interstices of the Pd lattice, so the most probable mechanism for diffusion of the H atom into Pd is diffusive jumps of the octapore-tetrapore-octapore type.*

Введение. Как известно, водород можно хранить и транспортировать в виде твёрдых гидридов металлов и интерметаллических соединений. Лучше всего водород растворяется в палладии. При наводороживании палладий расширяется, а при десорбции водорода – сжимается. Как выяснилось, этот процесс также влияет и на его механические свойства. По этой причине, палладий часто используется в качестве модельной системы для исследования водорода в кристаллической решетке металла. Для описания системы палладий-водорода часто используют полуэмперические методы расчёта, в том числе «из первых принципов». Целью данной работы является первопринципное исследование диффузионных барьеров и коэффициента диффузии твёрдого раствора водорода в палладии.

Метод и детали расчёта. В работе в рамках теории функционала электронной плотности методами ультрамягкого псевдопотенциала Вандербиля [1], реализованными в пакете программ ABINIT [2], была проведена оптимизация параметров решетки и релаксация положений всех атомов в расчетной ячейке чистого палладия и системы палладий-водород с относительной концентрацией атомов водорода $X = \text{H/Pd}$ равной 0,0625. Набор k-точек составлял $7 \times 7 \times 5$ для твёрдых растворов Pd_{16}H (ГЦК).

В твёрдом растворе Pd_{16}H атом H размещался равномерно по кристаллу либо в тетраэдрических T, либо в октаэдрических O междоузлиях. Чтобы рассчитать диффузионные барьеры для атома водорода в решетке палладия при относительной концентрации $X = \text{H/Pd} = 0,0625$, нужно найти все возможные направления диффузионных скачков атома H в Pd, и потом определить путь с минимальными по высоте и длине диффузионными барьерами. После этого, вычислить коэффициент диффузии каждого барьера. Предполагалось, что при высоких температурах время диффузионного скачка намного меньше времени

релаксации решетки. В результате, при сдвиге атома водорода вдоль линий, соединяющих соседние междоузлия, мы фиксировали атомы палладия в положениях, соответствующих ситуации, когда водород находится в исходном междоузлии.

Результаты и выводы. Высота барьера ΔE в различных точках линии смещения рассчитывалась следующим образом

$$\Delta E = E_i - E_0,$$

где E_i – полная энергия элементарной ячейки с атомом водорода, расположенным в точке на линии смещения; E_0 – полная энергия элементарной ячейки с атомом водорода в исходном междоузлии.

Результаты расчетов представлены на рисунке 1.

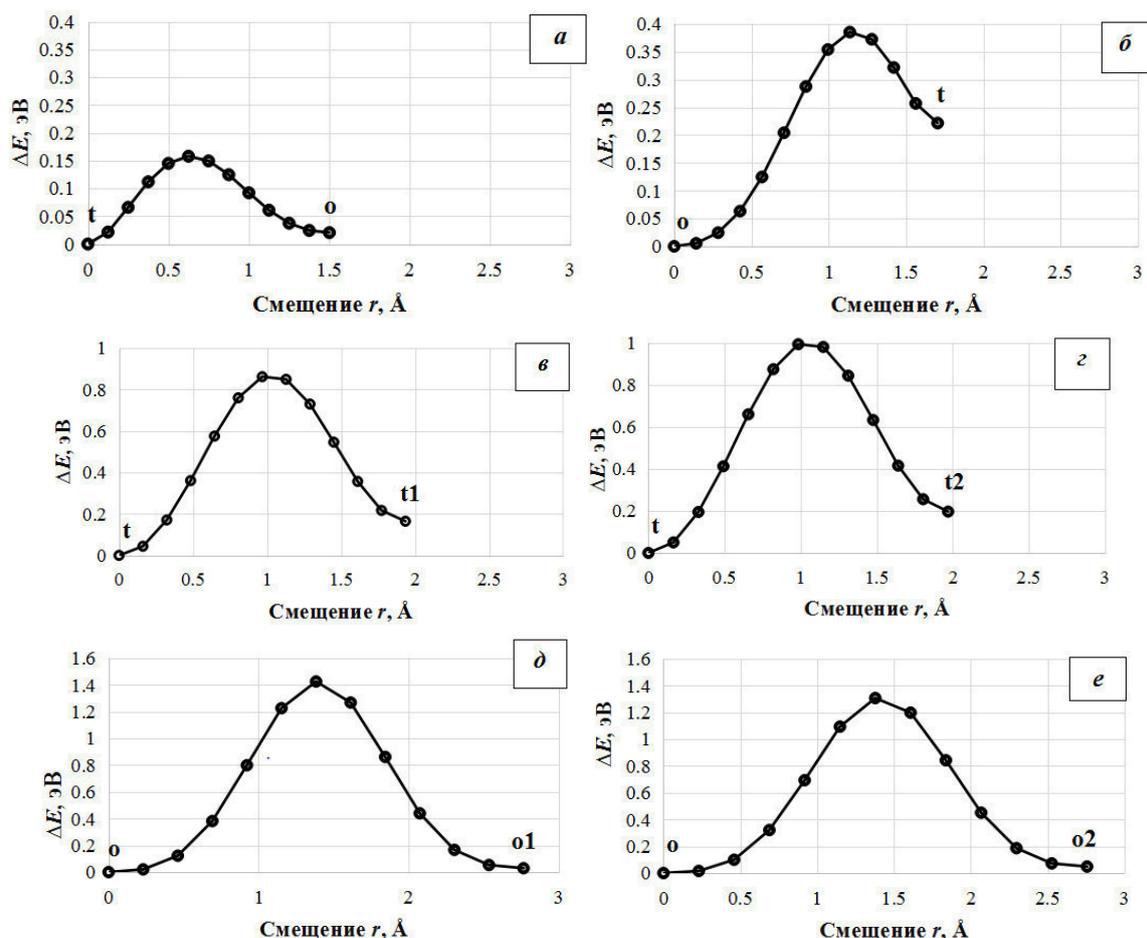


Рис. 1. Барьеры диффузии для атомов водорода в твердом растворе Pd_{16}H :
а – барьер $t \rightarrow o$; б – барьер $o \rightarrow t$; в – барьер $t \rightarrow t1$; з – барьер $t \rightarrow t2$; д – барьер $o \rightarrow o1$;
е – барьер $o \rightarrow o2$

Из рисунка 1 можно видеть, что минимальные барьеры диффузии соответствует переходу атома водорода из тетраэдрического междоузлия в октаэдрическое и обратно (величина барьеров $t \rightarrow o$ и $o \rightarrow t$ составляет ~ 0,16 и 0,39 эВ, соответственно). Величина барьеров между тетраэдрическими междоузлиями варьируется в пределах 0,8-1,0 эВ. Величины диффузионных барьеров между октаэдрическими междоузлиями превышают 1,2 эВ. Поэтому наиболее вероятным механизмом диффузии атома Н в Pd являются диффузионные скачки типа октапора – тетрапора – октапора.

В наиболее общем виде коэффициент диффузии определяется таким образом [3]

$$D = D_0 e^{-Q/kT},$$

где Q – высота барьера, k – константа Больцмана, T – температура, D_0 – предфактор, который часто считается не зависящим от температуры T . D_0 рассчитывался следующим образом

$$D_0 = \frac{v \cdot d^2}{N},$$

$$v = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m_p}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{2C}{m_p}},$$

где v – частота колебания атома водорода, d – длина барьера, N – количество эквивалентных диффузионных скачков атома водорода, C – коэффициент квадратичного члена, m_p – масса ядра атома водорода. Полученный коэффициент диффузии представлен на рисунке 2. Из рисунка 2 можно видеть, что самые большие коэффициенты диффузии соответствует минимальные барьеры диффузии, т.е. переход атома водорода из тетраэдрического междоузлия в октаэдрическое и обратно (значение коэффициентов диффузии составляет $\sim 10^{-8}$ и 10^{-10} м²/с, соответственно).

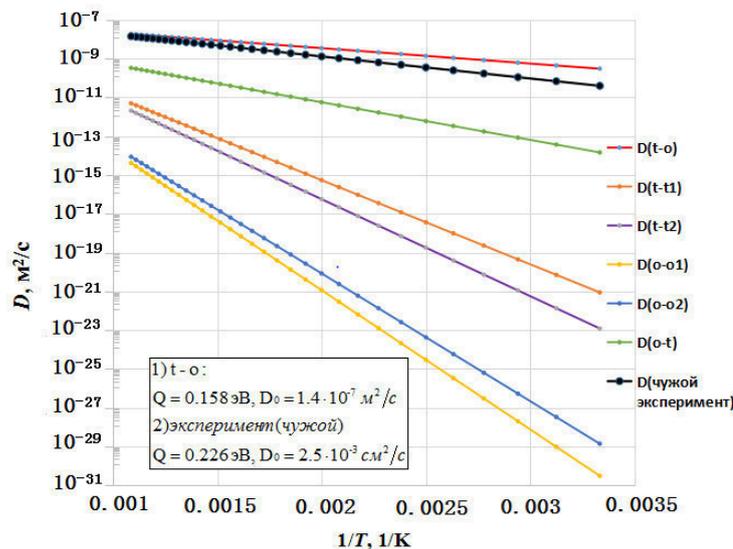


Рис. 2. Зависимость коэффициента диффузии от обратной температуры в системе Pd₁₆H (чужой эксперимент в работе [4])

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Метод псевдопотенциала [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://test.kirensky.ru/master/articles/monogr/Book/Chapter_1_4.htm.
2. ABINIT – abinit [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.abinit.org> – 21.12.16.
3. Erich Wimmer, Walter Wolf, Jürgen Sticht. Temperature-dependent diffusion coefficients from ab initio computations: Hydrogen, deuterium, and tritium in nickel // Phys. Rev. Lett. – 2008. – Vol. 77. – № 12. – P. 3865-3868.
4. Н. Wipf. Diffusion of hydrogen in metals // North-Holland Publishing Company. – 1981. – Vol.8. – P. 631-638.

ВНЕДРЕНИЕ ВОДОРОДА В ТИТАН ПЛАЗМЕННЫМИ МЕТОДАМИ

Е.Д. Даулетханов, Чжань Тяньюань

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. Н.Н. Никитенков

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: erhat92@mail.ru

INTRODUCING OF HYDROGEN INTO TITANIUM BY PLASMA METHODS

E.D. Dauletkhanov, Zhang Tianyuan

Scientific Supervisor: Prof., Dr. Sci. (Phys.-Math) N.N. NIKITENKOV

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: erhat92@mail.ru

***Abstract.** In the present work, the mechanisms of interaction of hydrogen with titanium during the introduction of hydrogen by plasma methods were investigated. Hydrogen was introduced from the hydrogen plasma of a high-frequency discharge (HFD) and was implanted from gas-discharge plasma on the basis of a "PINK" source. Implantation results in significant hydrogen enrichment of the near-surface layer to a depth of 0.6 μm . Implantation does not lead to significant change in the crystalline parameters and the creation of hydride phases. The obtained results suggest the following features of the hydrogen introduction. When irradiated with low energy H^+ ions from the "PINK" source, most of it is reflected from the surface and does not pass into the volume. H^+ ions of the HFD plasma interact with the sample surface with thermal energies, and hydrogen is captured by surface defects with subsequent diffusion to volume defects.*

Введение. Модификация металлов внедрением водорода важна в материаловедении с точки зрения исследования механизмов водородного охрупчивания материалов и покрытий. В российской и зарубежной литературе имеется много работ [1–3], посвященных исследованиям накопления водорода в титановых сплавах при наводороживании из газовой среды и из электролитов. При этом работ, посвященных внедрению водорода в титан из плазмы, крайне мало. Однако такие работы являются крайне актуальными для понимания механизмов взаимодействия водорода с материалами при различных способах внедрения водорода. Целью данной работы является исследование механизмов накопления водорода в титане при облучении высокоинтенсивными импульсно – периодическими пучками ионов низкой энергии и, для сравнения, из водородной плазмы высокочастотного разряда.

Материалы и методы исследования. Для исследования были подготовлены образцы титана марки ВТ1-0 с размерами 20×20×1 мм. Поверхность образцов титана до облучения водородом были механически отшлифованы и отполированы для удаления приповерхностных окисных пленок.

В настоящей работе водород внедрялся из 2-х видов плазмы: 1) водородной плазмы высокочастотного разряда [4], при этом насыщаемый образец был «подвешен» (не заземлен и не подано напряжение) в генераторе плазмы; 2) газоразрядной плазмы на основе источника PINK [5] на установке [6], при этом ионы водорода извлекались из плазмы и ускорялись, а затем ионный пучок фокусировался в эквипотенциальном пространстве дрейфа плазменно – иммерсионной системы находящейся под

импульсно периодическим потенциалом смещения с амплитудой 0.9–1.2 кВ, для многократного увеличения плотности тока.

После облучения и насыщения ВЧР плазмы были проведены измерения концентрации водорода при помощи анализатора водорода RHEN602 фирмы LECO [7]. Профили распределения водорода получены на спектрометре плазмы тлеющего заряда [8] GD-Profilер 2 фирмы Horiba. Исследование фазового состава и структурных параметров образцов после облучения проводилось на дифрактометре XRD-7000S с использованием рентгеновской линии излучения CuK α . Полученные спектры рентгеновской дифракции обрабатывались с помощью программного обеспечения POWDER CELL 2.4 [9]. Спектры термостимулированного газовыделения водорода из образцов были получены на установке для изучения термо- и радиационно-стимулированного газовыделения (НИ ТПУ) [10].

Результаты и их обсуждение. На рисунке 1 представлены спектры термостимулированного газовыделения водорода (ТСГВ) H $_2$ из образцов титанового сплава ВТ1-0 насыщенных двумя методами: облучения высокоинтенсивными импульсно – периодическими пучками ионов водорода низкой энергии из водородной плазмы при разных параметрах внедрения (1 – Ti $_1$, 2 – Ti $_2$) (Ti $_1$: плотность тока – 0.11 А/см 2 , доза – 7.4·10 20 ион/см 2 , температура образца – 360 °С и Ti $_2$: плотность тока – 0.17 А/см 2 , доза – 1.1·10 21 ион/см 2 , температура образца – 390 °С). Из плазмы ВЧР (кривая 3): давление в плазменном реакторе ~ 10 $^{-1}$ мм.рт.ст., температура образца – 400 °С, время насыщения – 95 мин.

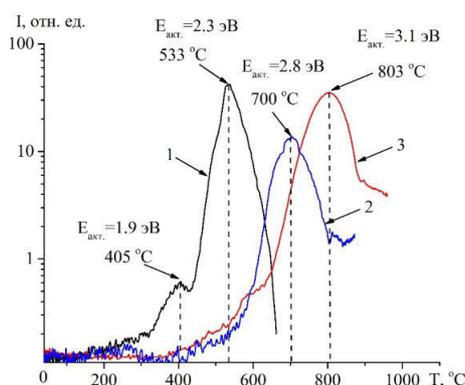


Рис 1. Спектры ТСГВ H $_2$ из образцов титанового сплава ВТ1-0 насыщенных с разными методами: 1, 2– образцы Ti $_1$, Ti $_2$ после облучения ионами водорода из PINK - плазмы; 3 – из плазмы ВЧ-разряда

В температурном спектре водорода из образца Ti $_1$ (рис.1, кривая 1) наблюдается два пика, один низко интенсивный, соответствующий температуре 405 °С и один высоко интенсивный при температуре пика 533 °С. Что соответствует энергии активации десорбции 1.9 эВ и 2.3 эВ. Это указывает на то, что в этих образцах при облучении формируются, как минимум 2 типа водородных ловушек. При десорбции водорода из образца Ti $_2$ наблюдается пик, который соответствует температуре 700 °С, при энергии активации 2.8 эВ. Столь разное поведение спектров 1, 2 обусловлено более высокой внедренной дозой и температурой облучения. Отличие поведения кривой 3 от 1 и 2, объясняется, по-видимому, механизмами внедрения водорода, состоящими в следующем. При облучении низкоэнергетичными ионами водорода, большая часть отражается от поверхности и в объем не проходит. Ионы H $^+$ плазмы ВЧР взаимодействуют с поверхностью образца с тепловыми энергиями, и водород захватывается дефектами

поверхности с последующей диффузией на дефекты объёма. Существенные различия в спектрах ТСГВ объясняются образованием различного типа ловушек при существенно разных параметрах облучения и насыщения из плазмы ВЧР. Предполагается что при 405–533 °С – водород захвачен на поверхностные дефекты, 700 °С – объёмные вакансии, 803 °С междуузлия и вакансионные кластеры.

Выводы. Имплантация приводит к значительному обогащению водородом приповерхностного слоя до глубины 0.6 мкм. Имплантация не приводит к значительному изменению кристаллических параметров и созданию гидридных фаз (в пределах чувствительности дифрактометра). Типы водородных ловушек (и их распределение по глубине), создаваемых при имплантации сильно зависят от режима имплантации. Плазма ВЧР «омывает» при тепловых энергиях поверхность образца и водород захватывается дефектами поверхности с последующей диффузией на дефекты объёма.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кудияров В.Н., Лидер А.М., Пушилина Н.С., Тимченко Н.А. Особенности накопления и распределения водорода при насыщении титанового сплава ВТ1-0 электролитическим методом и из газовой среды // Техническая физика. - 2014. - №9.
2. Бурнышев И. Н., Калюжный Д. Г. О катодном наводороживании титана / Химическая физика и мезоскопия, Т. 16, № 2, С. 250-256, 2014.
3. Методы исследования систем металл-водород: учебное пособие / Ю.П. Черданцев, И.П. Чернов, Ю. И. Тюрин. – Томск: Изд-во ТПУ, 2008. – 286 с.
4. Сыпченко В. С. Взаимодействие водорода с тонкой плёнкой Al₂O₃ на нанокристаллическом титане: диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук: спец. 01.04.07/В. С. Сыпченко; Национальный исследовательский Томский политехнический университет (ТПУ); науч. рук. Н. Н. Никитенков. – Томск, 2016.
5. Н.Н. Коваль, П.М. Щанин // http://ipms.bsnet.ru/conferenc/krnd_sem/doc-2/Kovalj.pdf.
6. Ryabchikov A.I., Sivin D.O. Investigation of behaviour of the vacuum arc microdroplets near and on the surface of the potential electrode during short-pulsed high-frequency plasma-immersion ion implantation // Известия высших учебных заведений. Физика. - 2012. - №12. - С. 76-83.
7. Кудияров В.Н. Изучение влияния ионизирующего излучения на перераспределение водорода в титановом сплаве ВТ1-0: диссертация на соискание квалификации магистра / В.Н. Кудияров; Национальный исследовательский Томский политехнический университет (ТПУ); науч. рук. Лидер А. М./ – Томск, 2013.
8. Нехин М., Кузнецов А., Шапон П. Спектрометр тлеющего разряда Profiler-2 –мощный аналитический инструмент послойного анализа материалов // Аналитика. – 2012. – Т. 5. – №. 4. – С. 34-43.
9. Горелик С. С., Скаков Ю. А., Расторгуев Л. Н. Рентгенографический и электронно-оптический анализ //М.: МИСиС, 1994, 328с. – 1994.
10. Никитенков Н.Н., Хоружий В.Д. Исследование выхода изотопов водорода методами термогазовыделения: методические указания к лабораторным работам / Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2007. – 49 с.

**ВЕРИФИКАЦИЯ РОТАЦИОННЫХ МЕТОДИК ОБЛУЧЕНИЯ НА ОСНОВЕ ПЛОСКИХ
И ОБЪЕМНЫХ МАТРИЧНЫХ ДЕТЕКТОРОВ**

М.Г. Двуреченский, Е.С. Сухих

Научный руководитель: старший преподаватель, к. ф-м. н., Е.С. Сухих
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050
E-mail: whitediabl@gmail.com

**VERIFICATION OF ROTATION METHODS OF IRRADIATION BASED ON FLATS
AND VOLUME MATRIX DETECTORS**

M.G. Dvurechenskiy, E.S. Sukhikh

Scientific Supervisor: senior lecturer, PhD, E.S. Sukhikh
National Research Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050
E-mail: whitediabl@gmail.com

***Abstract.** The results of a comparison of planar and bulk matrix detectors are presented in this paper to test irradiation techniques with intensity modulation. Verification was performed on two and three-dimensional matrix detectors MatriXX, Ocravius and ArcCHECK. And it was evaluated with gamma-indeksa*

Введение. Система планирования лучевой терапии Мопасо предназначена для создания планов лучевой терапии для пациентов с онкологическими заболеваниями, которым назначена дистанционная лучевая терапия. Система позволяет рассчитать и представить (на экране или в виде распечатки) значения распределения дозы облучения внутри тела пациента для заданных параметров плана лучевой терапии (в двумерном или трехмерном режиме).

Для проверки планов, используют двух или трехмерные матричные детекторы. И оцениваются при помощи гамма-индекса. Результаты гамма-индекса используется для количественной оценки совпадения между расчетами распределения поглощенной дозы в системе дозиметрического планирования и измеренными распределениями поглощенной дозы с помощью фантомных детекторов.

Актуальность. Необходимость верификация дозиметрический планов с высокой степенью модуляции флюенса пучка (т.е. сравнение рассчитанных с измеренными результатами) заключается в том, что не всегда рассчитанный план может быть воспроизведен полностью правильно, поскольку система планирования используется определенные алгоритмы, которые имеют свои ограничения по точности распределения дозы в гетерогенной и однородной среде.

Цель работы: определить, наиболее эффективное оборудование по верификации ротационной методики путем сравнения результатов с двумерных матричных детекторов MatriXX, OCTAVIUS 1500 и трехмерного детектора ArcCHECK.

Материалы и методы исследования. ArcCHECK является 4D детекторной матрицей. Имеет уникальную форму цилиндрического детектора, близкую к изотропной, не зависящую от угла гантри.

Детекторы ArcCHECK и угол падения остается когерентным подаваемому пучку независимо от его угла. Геометрия детектора BEV не изменяется при изменении угла. Детекторы располагаются на HeliGrid™, которая увеличивает скорость регистрации и снижает пересечение и затенение детекторов с

видом со стороны пучка (BEV), сравнимые с 2D системами. (Рисунок 1). Центральное поле 10x10 см ArcCHECK содержит 221 детектор. Измеряются дозы на входе и выходе, по сути удваивая плотность детекторов в измеряемом поле. ArcCHECK производит измерения при каждом импульсе и записывает данные с интервалом 50мс. Ограничения на измеряемую дозу отсутствуют, а дискретность измерения выше 0,2% при ротационной подаче при низкой скорости облучения [1].

Детекторы MATRIXX. MatriXX 2D-детекторная матрица состоит из 1020 пиксельных камер, равномерно распределенных между площадью 24 x 24 см² при 100 см SDD. (Рисунок 2). Расстояние между отдельными детекторами составляет 7,6 мм (от центра к центру). Параллельное считывание всех 1020 детекторов с минимальной частотой дискретизации 20 мсек позволяет получать как отдельные сегменты IMRT, так и общую интегрированную дозируемую дозу. MatriXX легко настраивается и выравнивается. Его можно использовать в тканеэквивалентном фантоме или в держателе гантри, прикрепленном к головке LINAC [2].

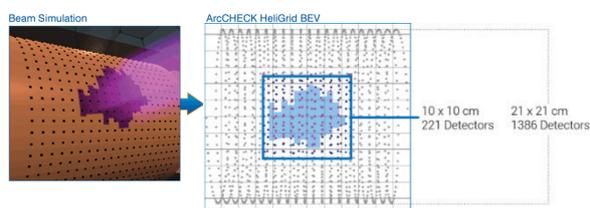


Рис. 1 Схема детектор ArcCHECK

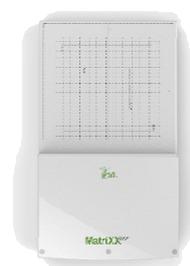


Рис. 2 – детектор Matrixx

Детекторы OCTAVIUS. OCTAVIUS Detector 1500 MR Представляет собой концепцию матрицы ионной камеры в плоскости для проверки IMRT и контроля качества в лучевой терапии. Использование ионных камер позволяет избежать радиационных дефектов, что является главным недостатком твердотельных детекторов. Вентилируемые плоскопараллельные ионные камеры имеют размер 4,4 мм x 4,4 мм x 3 мм, а расстояние между центрами составляет 7,1 мм. Всего в матрице расположено 1405 ионных камер, обеспечивающих максимальный размер поля 27 см x 27 см (рисунок 3).

Фантом OCTAVIUS имеет круглую форму в своем поперечном сечении и предназначен для обеспечения комплексной поверки планетарного IMRT-плана. Фантом сделан из полистирола, который имеет физическую плотность 1,06 г/см³. Его размеры составляют 32 см в ширину, 34,3 см в длину, 32 см в высоту и имеет центральную полость 30 x 30 x 2,2 см³ для размещения матрицы детектора. Фантом использует инклинометр, который прикреплен к гантри линейного ускорителя, чтобы обеспечить синхронное вращение OCTAVIUS 4D с помощью инклинометра, (Рисунок 4). В этой ситуации матрица детекторов всегда перпендикулярна лучу излучения [3].

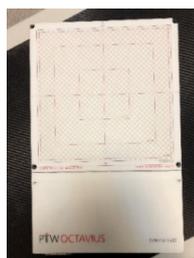


Рис. 3 – матрица OCTAVIUS 1500



Рис. 4- Фантомная установка OCTAVIUS4D на Elekta
Infinite в ЛРЦ г. Москва

Для исследования, предварительная проверка была выполнена для 20 планов VMAT, области лечения которых соответствовали HN (голова-шея) и раку предстательной железы. Подача лучей производилась на линейном ускорителе Varian с 6-MB и 10-MB. Дозовые распределения всех планов VMAT были получены матрицей MatriXX 2D, Phantom Octavius и трёхмерной диодной матрицей ArcCHECK.

Результаты исследований. Полученные распределения дозы оценивались с помощью гамма-индекса, а программное обеспечение 3DVH обеспечивало трехмерный гамма-индекс (3DVH (3D)). В таблице 1 показаны гамма-индексы и стандартные отклонения. Средняя степень совпадения по гамма-индексу была выше 95% для критерия 3% / 3 мм. В случаях рака области голова-шея средний гамма-индекс MatriXX оценивался ниже, чем у Octavius и ArcCHECK с критериями 2% / 2 мм.

Таблица 1

Сравнение Гамма-индекс и стандартное отклонение (Σ) при разных локализациях,
2-х и 3-х мерных детекторов

		3mm/3%	Σ	2mm/2%	Σ
NH – Голова шея	Octavius	98.51	1	93.44	2.8
	MatriXX	98.35	1.1	84.64	8
	ArcCHECK	98.79	2.4	94.8	8.1
Prostate	Octavius	98	1.9	89.57	3.9
	MatriXX	94.85	1.4	86.66	4
	ArcCHECK	97.5	0.7	91.74	2

Заключение. Разница в процентной дозе при критерии 3%/3мм дает схожий результат. Средний гамма-индекс для области предстательной железы, дает сходный результат при критерии 2%/2мм. Гамма-индекс для области голова-шея у Octavius и ArcCHECK был оценен выше, чем у MatriXX при критерии 2%/2мм. ArcCHECK дает более точный результат, из-за спирального положения детектора расположенных с двух сторон, что дает расстояние между детекторами 1мм.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. ArcCHECK® & 3DVH® The Benchmark for 3D VMAT QA [Электронный ресурс]. – режим доступа: <http://www.sunnuclear.com/solutions/patientqa/arccheck3dvh>. – 1.03.2018
2. Ji Hoon Park, Tae Gyu Kim¹, Soon Ki Min and Byung Do Park. Comparison of 3DVH Software with Two-dimensional Array Systems on Pretreatment Verification for Volumetric-modulated Arc Therapy // Nuclear Medicine & Radiation Therapy. – 2016. Т. 7. – №2. С. 2-3
3. Ann Van Esch, Katarzyna Basta, Marie Evrard, Michel Ghislain, Francois Sergent, and Dominique P. Huyskens. The Octavius1500 2D ion chamber array and its associated phantoms: Dosimetric characterization of a new prototype // Medical Physics. – 2014. – Т. 41. – № 9. С. 4-7

**РАЗРАБОТКА МЕТОДА ПОВЫШЕНИЯ ВОДОРОДНОЙ СТОЙКОСТИ ТИТАНОВОГО
СПЛАВА VT6**

Дин Цзыи, В.Н. Кудияров

Научный руководитель: доцент к.ф.-м.н. Пушилина Н.С.

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

**STAND FOR TESTING ELECTROCHEMICAL PERMEATION OF HYDROGEN THROUGH
METAL FOILS**

Ding Ziyi, V.N. Kudiyarov

Scientific Supervisor: Pushilina N.S.

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

***Abstract.** This work describes the permeability method which was used to study the sorption of hydrogen of metal. With the help of the Gas Reaction Controller (GRC), the adsorbed amounts of hydrogen can be recorded as a function of time, temperature and pressure. In this paper, the working principle is described, Wetting of VT6 samples to obtain a 100µm thick metal foil; carrying out experiments on the permeability of hydrogen with different coatings; Using the software for processing experimental data; The effect of various coatings on the permeability of hydrogen is compared.*

Титановые сплавы широко используются в медицине, автомобильной, аэрокосмической и химической отраслях промышленности благодаря сочетанию таких свойств как высокая прочность, малый удельный вес, высокая коррозионная стойкость, хорошая биосовместимость[1, 2]. Растворяясь в титановых сплавах, водород вызывает существенные изменения их физико-химических и механических свойств. Поэтому исследование предотвращения водородного повреждения кристаллической решетки титана и проницаемость водорода очень важно.

В качестве материала для исследований в данной работе использовался титановый сплав VT6. Образец представляли собой прямоугольные пластины размером 20x20x1 мм и шлифовался на шлифовальной бумаге до толщины 100 мкм. По завершению шлифования проводилась полировка образцов алмазными пастами. В качестве покрытия на титановый сплав в настоящей работе был выбран нитрид алюминия. Известно, что нитрид алюминия устойчив в атмосферах водорода и углекислого газа до 980 °С. Нанесение покрытий AlN производилось вакуумно-дуговым плазменно-ассистированным методом на ионно-плазменной установке «ТРИО-М». Образцы были промыты в ультразвуковой ванне в бензине и спирте, в каждом в течение 10 мин. Откачка рабочей камеры проводилась до давления ~10⁻³ Па. Перед напылением покрытий поверхность образцов очищалась ионами аргона с энергией до 1 кэВ от оксидных пленок и адсорбированных газов. Скорость роста покрытий составила 6 мкм/ч. Насыщение образцов водородом проводилось на комплексе Gas Reaction Controller, при давлении водорода 2 атмосферы и температуре 600 °С. Элементный анализ образцов проводился методом энергодисперсионного анализа, структурно-фазовое состояние исследовалось методом рентгеноструктурного анализа. Структура поверхности образцов после нанесения покрытий изучалась

методом сканирующей электронной микроскопии. В настоящей работе был использован метод Виккерса. Метод виккерса (HV) был разработан в Англии в 1925 году и был официально известен как тест на твердость алмазной пирамиды (DPH). Тест Виккерс имеет два различных диапазона усилий, микро (от 10 г до 1000 г) и макро (от 1 кг до 100 кг), чтобы покрыть все требования к тестированию. Индентор одинаков для обоих диапазонов, поэтому значения твердости по Виккерсу являются непрерывными во всем диапазоне твердости для металлов (обычно от HV100 до HV1000). Для вычисления твердости по Виккерсу использовалась следующая формула:

$$HV = \frac{2F \sin \frac{\alpha}{2}}{d^2} = 1.8544 \frac{F}{d^2} \text{ (кг/мм}^2\text{)} \quad (1)$$

где HV - Твердость по методу Виккерса (кг/мм²), α – наклон алмазного индентера пирамидальной формы, F – испытательное усилие, d – средняя длина диагонали отпечатка (мм).

Результаты энергодисперсионного анализа образцов представлены в таблице 1.

Таблица 1

Энергодисперсионный микроанализ сплава ВТ6 после нанесения покрытия

Образцы	Элемент wt%	Параметр a	Параметр z
ВТ6+покрытие AlN	Al 84.54	0.8477	0.9940
	N 8.72	0.1465	1.0685
	Ti 2.90	0.8850	0.9138
	O 2.73	0.1705	1.0613
	Fe 1.11	0.9740	0.9199

На рисунке 1 представлена структура поверхности образцов после нанесения покрытий.

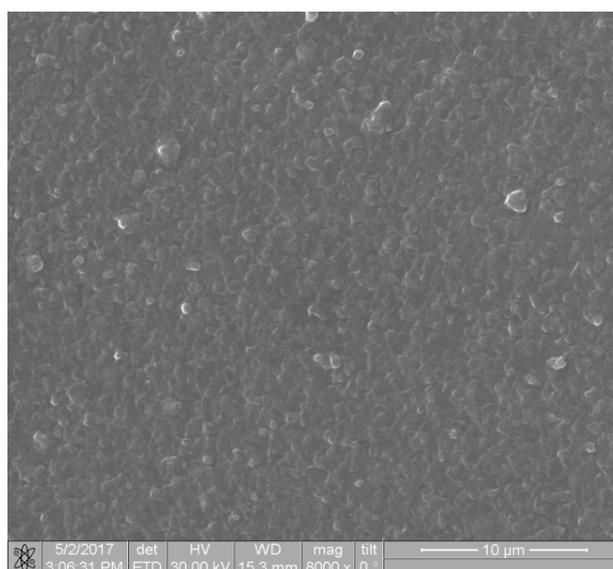


Рис. 1. Структура поверхности образцов сплава ВТ6 после нанесения покрытий

На рисунках 2 приведены изотермы поглощения водорода сплавом ВТ6 после нанесения покрытия и

без покрытия соответственно. Установлено, что нанесение покрытия AlN приводит к снижению скорости поглощения водорода сплавом ВТ6.

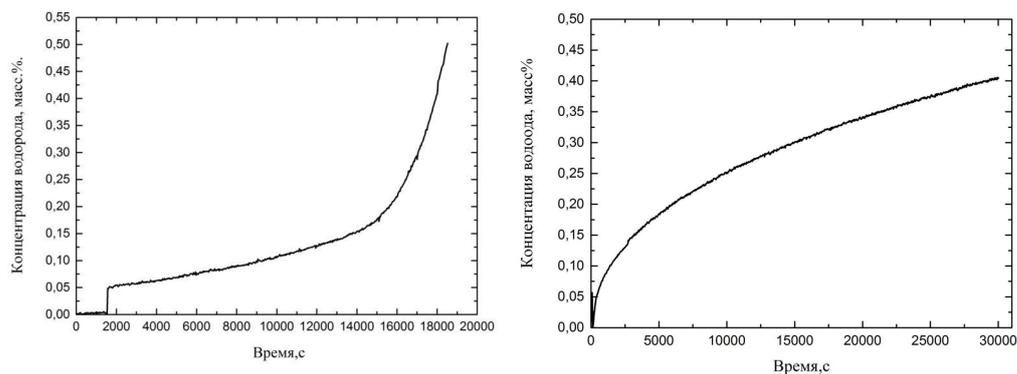


Рис. 2. График зависимости концентрации водорода от времени для фольги титанового сплава ВТ6 толщиной 100 мкм: а – с покрытием AlN; б – без покрытия AlN

Результаты исследования твердости образцов в зависимости от вида обработки поверхности приведены в таблице 2.

Таблица 2

Параметры твердости сплава ВТ6 до и после нанесения покрытий и наводороживания

Образцы	Нагрузка, кг	Диагональ d, мм	HV
Исходный	0.3	2.064	210±30
После нанесения AlN	0.3	1.281	543±41
После нанесения AlN и насыщения водородом (1.6 масс%)	0.3	1.584	354±35

Установлено, что нанесение покрытий приводит к увеличению микротвердости поверхности титанового сплава. При этом твердость наводороженных образцов ниже на ~ 40 % твердости исходных образцов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Gurrappa I. Characterization of titanium alloy Ti-6Al-4V for chemical, marine and industrial applications // Materials Characterization. – 2003. – V. 51, Issues 2-3. – P. 131-139.
- Brewer W. D., Bird R. K., Wallace T. A. Titanium alloys and processing for high speed aircraft // Materials Science and Engineering: A. – 1998. – Volume 243, Issues 1-2. – P. 299-304.
- Максимов Е Г, Панкратов О А. Водород в металлах[J] // Успехи физических наук. – 1975. – V. 116(7) . – P. 385-412.
- Kudiiarov V. N, Gulidova L. V, Pushilina N. S, et al. Application of automated complex Gas Reaction Controller for hydrogen storage materials investigation[C]//Advanced Materials Research. Trans Tech Publications, 2013, 740: 690-693.

**ОПТИМИЗАЦИЯ КОНФИГУРАЦИИ АКТИВНОЙ ЗОНЫ РЕАКТОРА ИРТ-Т ДЛЯ ОБЛУЧЕНИЯ
СЛИТКОВ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КРЕМНИЯ БОЛЬШОГО ДИАМЕТРА**

С.К. Дмитриев, Д.Е. Золотых, И.И. Лебедев

Научный руководитель: доцент, к.ф.-м.н. А.Г. Наймушин

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: skd1@tpu.ru

**OPTIMIZATION OF CONFIGURATION OF THE IRT-T REACTOR CORE FOR IRRADIATION OF
THE LARGE DIAMETER MONOCRYSTALLINE SILICON**

S.K. Dmitriev, D.E. Zolotykh, I.I. Lebedev

Scientific Supervisor: PhD, A.G. Naymushin

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: skd1@tpu.ru

***Abstract.** Among all the existing methods of impurity implantation, the highest homogeneity of the electrophysical parameters of silicon is achieved using the technology of neutron transmutation doping (NTD). Therefore, silicon, doped by this technology, is widely used in the world practice to create devices with a minimum scatter of specific electrical resistance: thyristors, charge-coupled devices, radiation detectors, photodetectors. Interest to NTD is due to its two main advantages over conventional metallurgical methods of introducing impurities. This, first, high doping accuracy, since the concentration of impurities introduced at a constant neutron flux is proportional to the time of irradiation, which can be controlled with great accuracy. Secondly, this is a high homogeneity of impurity distribution, which is determined by the random distribution of isotopes and neutron capture cross sections. The creation of technology of NTD of silicon with given properties is a complex problem. To solve it, it is necessary to fulfill the following conditions: to ensure high homogeneity of neutron fluence and optimize the neutron-physical parameters of the irradiation zone to obtain a thermalized neutron spectrum.*

Введение. Исследовательские ядерные реакторы, как инструмент для радиационной обработки материалов, обладают большим потенциалом. Как правило, исследовательские ядерные реакторы характеризуются небольшими размерами активной зоны и большим градиентом величины плотности потока нейтронов. Поэтому для них актуальной является задача определения условий равномерного облучения образцов больших размеров с малой пространственной неоднородностью. Её решение особенно важно для реализации технологий нейтронного трансмутационного легирования слитков кремния. Одним из немногих объектов в РФ, реализующих нейтронное трансмутационное легирование кремния, является исследовательский ядерный реактор ИРТ-Т. На сегодняшний день технология НТЛ на ИРТ-Т освоена на высоком уровне. Процесс облучения слитков кремния организован в экспериментальных каналах, позволяющих облучать образцы размером до 125 мм и достигать объемной неравномерности легирования до 3%. Таким образом, целью настоящей работы является проектирование

и создание нового экспериментального канала, который бы позволил применить технологию НТЛ для образцов кремния до 200 мм без потери предъявляемых к ним требований.

Математическая модель проектируемого канала. Исследовательский ядерный реактор ИРТ-Т является типовым реактором, работающим в составе Национального исследовательского Томского политехнического. Активная зона реактора расположена в бассейне под водой на глубине 6,5 м, которая состоит из ТВС, окруженных бериллиевым отражателем. В центре активной зоны установлены блоки ловушки нейтронов, в которых имеются каналы для размещения экспериментальных устройств диаметром до 40 мм. На рисунке 1 указано расположение экспериментальных каналов в реакторе ИРТ-Т.

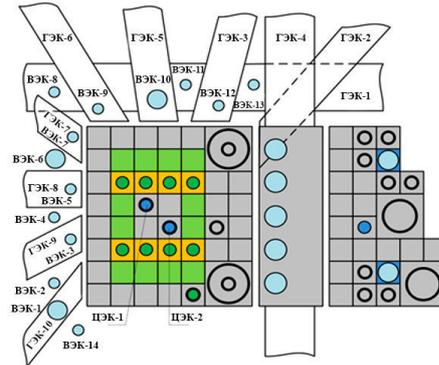


Рис. 1 – Расположение экспериментальных каналов в реакторе ИРТ-Т

После анализа геометрии активной зоны реактора ИРТ-Т принято решение, используя программное средство MCU-PTR, построить в полномасштабной модели реактора [1] новый облучательный объем. Для проведения исходных расчётов построена графитовая призма и все необходимые металлоконструкции для её установки. С учетом предъявляемых требований к размерам кремниевых слитков, были выбраны следующие размеры графитовой призмы: 500x500x680 мм. с зазором 5 мм между активной зоной и призмой [2].

Результаты расчёта. Как правило, управление ядерным реактором в стационарном режиме осуществляет органом автоматического регулирования, который находится ближе всех органов регулирования к новому облучательному объёму. Именно поэтому, было принято решение оценить влияние АР на нейтронное поле в области призмы. На ближайшей к активной зоне грани призмы был сформирован ряд регистрационных зон. Для решения поставленной задачи были произведены расчёты отдельных состояний ядерного реактора при движении АР с интервалом 5 см и свежей загрузкой активной зоны, при этом органы регулирования АЗ и КС-3-*j* были на ВКВ, а органы регулирования КС-1-*j*, КС-2-*j* на высоте 30 см. Результаты расчёта представлены на рисунке 2.

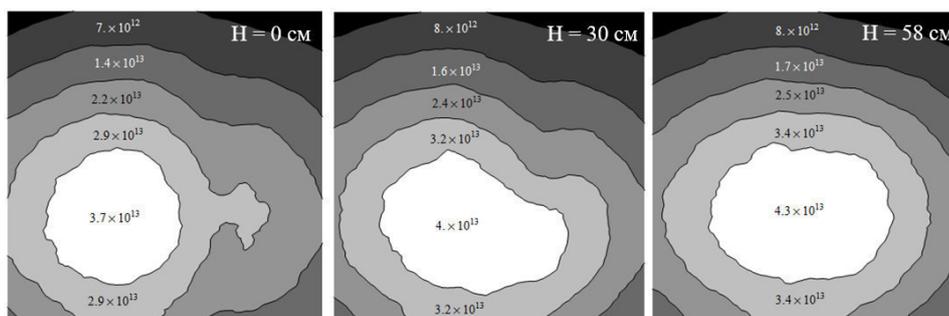


Рис. 2 – Зависимость формы нейтронного поля на поверхности призмы от глубины погружения АР

Проведя анализ зависимости формы нейтронного поля при движении АР и ряд оптимизационных расчётов, принято решение модернизировать модель, добавив экспериментальный канал в область графитовой призмы. С учётом необходимых конструктивных элементов радиус цилиндрического отверстия составляет 117 мм и радиус кремниевого образца 102 мм. Схема расчётной модели представлена на рисунке 3.

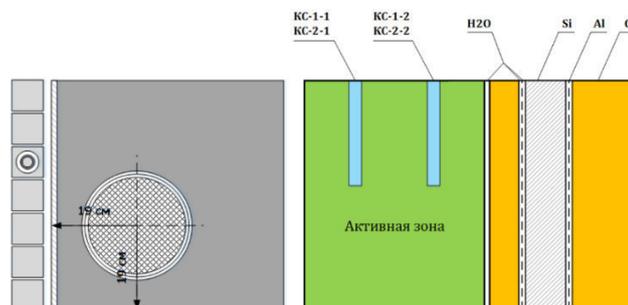


Рис.3 – Схема модели с новым экспериментальным каналом

Результаты расчета влияния создания экспериментального канала и установки кремниевого образца приведены на рисунке 4.

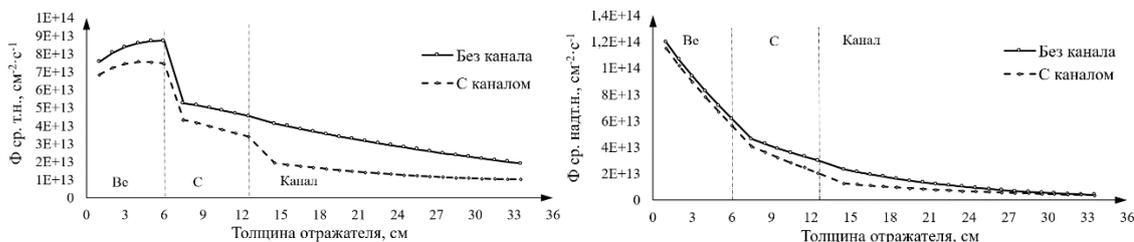


Рис.4 – Профиль распределения надтепловых и тепловых нейтронов в призме

Из полученных результатов видно, что появление канала с образцом кремния в расчётной модели оказывает существенное влияние на распределение нейтронного поля из-за различных замедляющих свойств среды.

Заключение. Во время выполнения работы предложена модель нового экспериментального облучательного объема на реакторе ИРТ-Т, который позволит производить нейтронно-трансмутационное легирование слитков кремния диаметром до 200 мм с высокой точностью легирования. Расширена полномасштабная модель реактора ИРТ-Т в программе MCU-PTR. Произведена оценка влияния органов регулирования на формирование нейтронного поля в области нового облучательного объема. И с учетом этого, было предложено местоположение экспериментального канала в области призмы. Помимо этого, выявлен ряд закономерностей величины плотности потока от режимов движения органов регулирования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Naymushin A. G. , Anikin M. N. , Lebedev I. I. , Busygin A. S. , Dmitriev S. K. , Zolotykh D. E. Features of fuel burnup calculation for IRT-T reactor using MCU-PTR code // Journal of Industrial Pollution Control. - 2016 - Vol. 32 - №. 2. - p. 449-452
2. Дмитриев С.К., Лебедев И.И., Аникин М.Н., Чертков Ю.Б. Моделирование расположения нового облучательного объема для НТЛ кремния в реакторе ИРТ-Т // Сборник тезисов докладов VII Школы-конференции молодых атомщиков сибиря. – 2016. – с 113.

**ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИЗУЧЕНИЕ КОМПОНЕНТ ТЕНЗОРНОЙ АНАЛИЗИРУЮЩЕЙ
СПОСОБНОСТИ РЕАКЦИИ $\gamma d \rightarrow pp\pi^-$ В ОБЛАСТИ МАЛЫХ ПЕРЕДАНЫХ ИМПУЛЬСОВ**

С.К. Дмитриев, С.В. Мельченко, В.В. Гаузштейн

Научный руководитель: к.ф.-м.н. В.В. Гаузштейн

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: skd1@tpu.ru

EXPERIMENTAL STUDYING OF TENSOR ANALYZING POWER OF THE REACTION **$\gamma d \rightarrow pp\pi^-$ IN THE FIELD AT SMALL TRANSFER MOMENTA**

S.K. Dmitriev, S.V. Melchenko, V.V. Gauzshtein

Scientific Supervisor: V.V. Gauzshtein

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: skd1@tpu.ru

***Annotation.** The three components of the tensor analyzing power of the exclusive meson photoproduction reaction on deuterons measured simultaneously in the proton energy ranges 20–70 MeV are presented. The experiment made use of an internal tensor-polarized deuterium-gas target of the VEPP-3 electron storage ring and the two-proton coincidence recording method. The results obtained are compared with theoretical predictions.*

Введение. Являясь простейшей ядерной системой, дейтрон становится удобным объектом для исследования нуклон-нуклонных взаимодействий как с теоретической, так и с экспериментальной точки зрения. Прогресс в методах поляризационных экспериментов позволил получить данные о компонентах тензорной анализирующей способности, что, в свою очередь, позволяет получить важную информацию об амплитудах спиральности соответствующих реакций. Экспериментальные измерения компонент тензорной анализирующей способности для электро- и фотореакций на дейтроне были выполнены с использованием внутренней тензорно-поляризованной дейтериевой мишени электронного накопительного кольца ВЭПП-3 в Институте ядерной физики им. Будкера.

В работе [1] были получены T_{20} , T_{21} и T_{22} тензорной анализирующей способности для некогерентного фоторождения пиона на дейтроне в диапазоне энергий зарегистрированных протонов (50 – 200) МэВ.

В настоящей работе представлены результаты измерения T_{20} , T_{21} и T_{22} компонент тензорной анализирующей способности для некогерентного фоторождения пиона на дейтроне при малых импульсах конечных протонов.

Постановка эксперимента. Измерения были выполнены на накопителе электронов ВЭПП-3, общая схема эксперимента приведена на рис. 1. Детектирующая система проектировалась для регистрации фоторасщепления дейтрона [2], где нейтроны регистрируются верхним плечом, а протоны нижним. Верхнее и нижнее плечи расположены в вертикальной плоскости. Дополнительным каналом измерения был канал регистрации фотообразования π^- -мезонов, где два протона регистрировались на

совпадении верхним и нижним плечом. Результаты измерения асимметрии выходов по отношению к смене знака тензорной поляризации дейтронов и были использованы для расчета компонент тензорной анализирующей способности реакции $\gamma d \rightarrow pp\pi^-$. Средняя за время набора статистики величина поляризация атомов мишени $P_{zz}^+ = 0.341 \pm 0.025 \pm 0.009$ и величина отношения $P_{zz}^- / P_{zz}^+ = -1.70 \pm 0.15$.

Нижнее плечо регистрации состоит из системы дрейфовых и координатных камер, а также из трёх следующих друг за другом сцинтилляторов. Для получения результатов, представленных в данной работе, отбирались протоны, которые остановились в первом сцинтилляторе. Энергетический диапазон регистрации протонов в первом сцинтилляторе составил (15 – 50) МэВ. Дрейфовые камеры предназначены для измерения углов вылета протонов в нижнем плече. Вершинная камера регистрирует вершину взаимодействия, перпендикулярную оси пучка электронов и азимутальный угол. В условиях эксперимента погрешность измерения углов вылета протонов составила 0.5° .

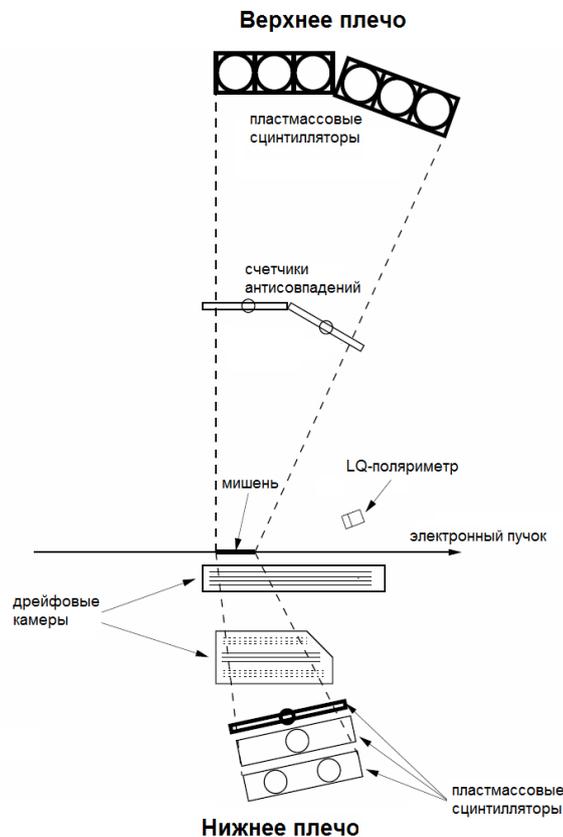


Рис.1. Схема размещения детектирующей аппаратуры эксперимента

Верхнее плечо регистрации состоит из двух сцинтилляционных детекторов. Первый сцинтилляционный счетчик расположен на расстоянии примерно 1.5 метра от мишени и имеет толщину 1 см. Его функция - идентификация заряженных частиц. Второй сцинтилляционный детектор состоит из набора толстых сцинтилляторов, находящихся на расстоянии примерно 3 метра от мишени. Этот сцинтилляционный детектор предназначен для измерения энергии по времени пролета и углов вылета протонов и нейтронов.

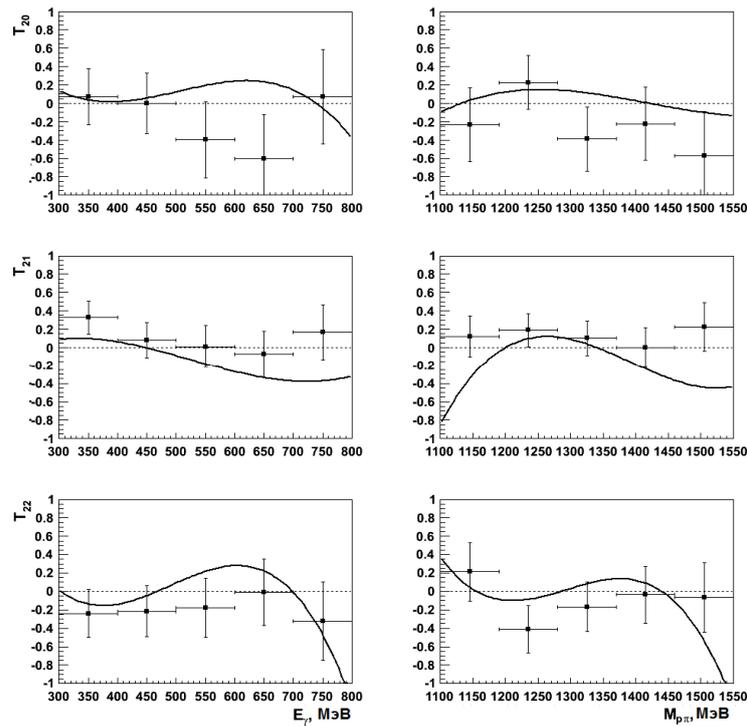


Рис 2. Зависимости T_{21} , T_{20} и T_{22} -компонент анализирующей способности реакции от энергии виртуального фотона и массы $p\pi$ -системы. Точками показаны результаты эксперимента, сплошная линия – результаты моделирования

Сопоставление экспериментальных результатов и результатов моделирования показывает, что поведение обеих зависимостей компоненты T_{22} удовлетворительно описывается теоретическими расчетами, выполненными в рамках модели [3]. Удовлетворительное описание зависимостей T_{21} в рамках этой модели наблюдается только для энергий фотонов до 500 МэВ, и для инвариантных масс $p\pi$ -подсистемы, лежащих в интервале (1200 – 1400) МэВ. Для компоненты T_{20} рассогласование результатов моделирования с экспериментальными данными является наиболее значительным. Из приведенных сопоставлений можно сделать вывод, что для описания фоторождения π^- -мезона на дейтроне при больших импульсах конечных протонов необходимо учесть кроме πN - и NN -взаимодействий в конечном состоянии более сложные механизмы, в частности, ΔN -взаимодействие в некоторых промежуточных состояниях. Поэтому полученные экспериментальные результаты дают возможность выделить эффект ΔN -взаимодействия на фоне πN - и NN -взаимодействий в конечном состоянии.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-32-00013.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гауштейн В.В., Зеваков С.А., Логинов А.Ю. и др. // Ядерная Физика. – 2015. – Т. 78. – № 1-2. – С. 3
2. Rachek I.A., Barkov L.M., Belostotsky S.L. et al. // Phys. Rev. Let. – 2007. – V. 98. – N. 17. – 182303
3. Логинов А.Ю., Сидоров А.А., Стибунов В.Н. // ЯФ. 2000. Т. 63. С. 459.

**МИКРОСТРУКТУРА И СВОЙСТВА СТАЛЬНЫХ ПОЛУФАБРИКАТОВ 308LSI, ПОЛУЧЕННЫХ
МЕТОДОМ ОСАЖДЕНИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ПРОВОЛОКИ**

Г.Д. Дронюк, А.Ю. Степанов

Научный руководитель: доцент, к.ф.-м.н. Е.И. Купрекова

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: gdd2@tpu.ru

**MICROSTRUCTURE AND PROPERTIES OF 308LSI STEEL
OBTAINED BY DEPOSITION OF METAL WIRE**

G.D. Dronyuk, A.Y. Stepanov

Scientific Supervisor: Associate Prof., PhD E.I. Kuprekova

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: gdd2@tpu.ru

***Abstract.** Shaped metal deposition (SMD) is a relatively new technology of additive manufacturing, which creates near-net shaped components by joining metallic materials by melting the area of a welding joint in high vacuum in the range from 10^{-3} to 10^{-6} mbar. In the present study, the main mechanical properties including micro-hardness and tensile properties were investigated. Single bead walls were deposited. Test pieces were machined from the deposited walls according to the National standard of Russia Federation for the mechanical tests. The tensile properties also showed dependence on the direction of the test carried out. All the examined tensile properties of the as deposited samples are close-matched properties of the as cast material.*

Введение. В настоящее время аддитивные технологии являются одним из наиболее динамично развивающихся направлений ресурсо-эффективного производства [1]. Использование послойной аддитивной укладки порошка, проволоки или прутков путем селективного лазерного сплавления (SLM - Selective Laser Melting) или послойного наваривания материала в расплаве электронным лучом (EBDM - Electron beam Direct Manufacturing) позволяет на порядок ускорить изготовление стальных изделий и их деталей. При этом основным фактором, определяющим подходят ли аддитивно сформированные детали для практического применения или нет, являются их механические свойства. Свойства должны быть сопоставимы со свойствами изделий, полученных при литье, ковке или других традиционных методах получения металлов. На сегодняшний день основное внимание специалистов в области аддитивных технологий уделяется дизайну и созданию деталей сложной и необычной геометрии, тогда как фундаментальные вопросы, связанные с формированием структуры в локальных областях высокоскоростного нагрева и охлаждения и ее влияния на механические свойства аддитивных металлов практически не рассматриваются. В связи с этим данная работа нацелена на исследование потенциальной возможности получения сплошных образцов при электронно-лучевом наплавлении стальной проволоки и изучение механических свойств полученных объемных образцов.

Материалы и методы исследования. Образцы для исследований получали на опытной установке для 3d-печати по EBDM –технологии, созданной ООО «Тэта», г. Томск. Установка включает электронно-

лучевую пушку с максимальным отклонением луча $\pm 7^\circ$ и рабочим давлением 10^{-1} Па, механизм подачи проволоки и стол с компьютерным числовым программным управлением для четырех-координатного перемещения: горизонтальное (ось x и ось y), вертикальное (ось z) и вращательное движение. Электронный пучок фокусируется в пятно размером $2 \text{ мм} \times 3 \text{ мм}$. На рис. 1 показан внешний вид экспериментальной установки и манипулятора, а также схема подачи проволоки и ориентации пучка.

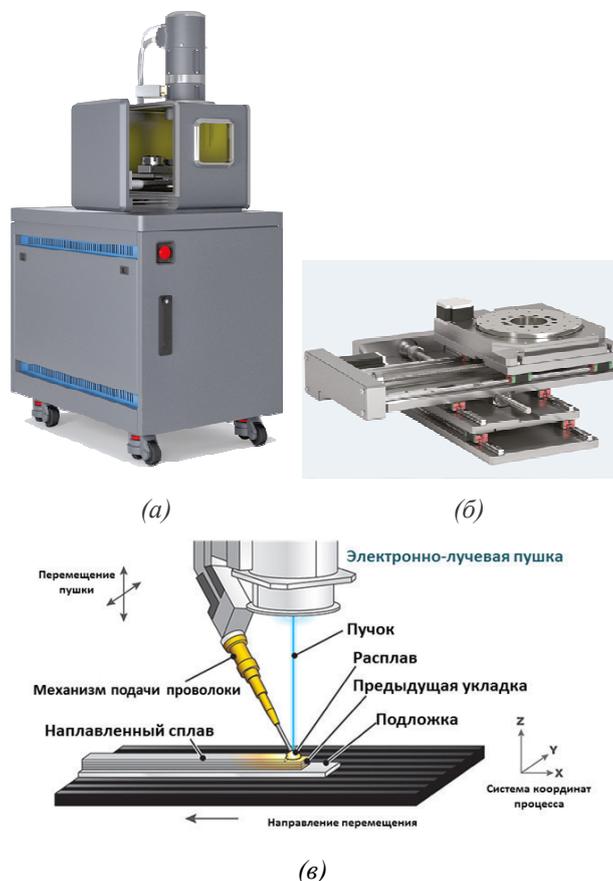


Рис. 1. Электронно-лучевая установка (а) и манипулятор (б) (ООО «Тэта», г. Томск) и схема подачи проволоки (в)

Для получения экспериментальных образцов была выбрана проволока стали нержавеющей стали 308LSi диаметром 0,8 мм, которая послойно наплавлялась на 10-миллиметровую стальную пластину с шагом (0,3-0,4) мм вдоль оси роста z (рис. 1в). Эксперимент проводили при передней подаче проволоки (рис. 1в, рис. 2) с фиксированным углом подачи 55° и ускоряющим напряжением 60 кВ. Электронный пучок фокусировался в пятно $0,5 \times 0,6 \text{ мм}^2$. В результате были получены плоские стенки высотой толщиной, соответствующей укладке проволоки одного диаметра. Из полученных стенок на электроискровом станке вырезаны образцы для механических испытаний на растяжение и определения микротвердости. Образцы на растяжение имели форму лопаток с прямоугольным сечением $2 \times 3 \times 15 \text{ мм}^3$. Растяжение проводили на универсальной испытательной машине LFM-125 (Walter+Bai AG, Швейцария) при комнатной температуре со скоростью 1 мин^{-1} . На образцах в форме параллелепипедов $2 \times 5 \times 15 \text{ мм}^3$, вырезанных вдоль и перпендикулярно направлению укладки проволоки проводили исследование фазового состава и микротвердости по Виккерсу. Испытания проводили при нагрузке 0,2 кгс в течение 20 сек на тестовой машине KB Hardwin KB 30 (производитель KB Pruftechnik, Германия). Фазовый

анализ проводился с использованием CuK_α излучения в диапазоне углов - $10-90^\circ$ с шагом сканирования $0,0143^\circ$, и накоплением в точке 2,149 с. Дифракционные картины регистрировали при помощи широкоугольного высокоскоростного 1280-канального детектора OneSight.

Результаты. Металлографические исследования показывают, что наплавленные по EBDM-технологии стенки оказываются плотными. Пор и несплошностей экспериментально не обнаружено. Наблюдается формирование зоны термического влияния (ЗТВ) после каждой укладке каждого последующего слоя. Глубина ЗТВ составляет (0,2–0,3) мм. ЗТВ формируется в центре срединной линии, проведенной через середину наплавленной стенки от ее вершины к основанию. Образование ЗТВ обусловлено тем, что в процессе печати наплаваемый материал проволоки и нагретый основной материал подложки охлаждаются с различной скоростью.

РФА показал, что в аддитивно наплавленных по EBDM-технологии стенках формируется кубическая фаза $\text{Fe}_{0,8}\text{Ni}_{0,2}$ с высоким содержанием в объеме (87 - 91 %). Параметры решетки фазы $\text{Fe}_{0,8}\text{Ni}_{0,2}$ составляют $a \sim 3,6$ нм. Размеры кристаллитов, оцененные по ОКР, достигают 18 нм и 22 нм. Также дополнительно формируется αFe -фаза с параметром решетки $a \sim 2,8$ нм и небольшой объемной долей (9 – 13) %.

Испытания на твердость по Виккерсу проводили на образцах двух типов: вырезанных вдоль и перпендикулярно направлению укладке проволоки. Экспериментально установлено, что твердость аддитивно сформированных образцов слабо зависит от направления укладке и изменяется в среднем от 310 до 360 HV. Эти значения коррелируют со значениями твердости литых образцов, изготовленных из стали такого же состава. Отмечается резкое уменьшение микротвердости в областях, близких к концу укладке депозита.

Испытания на растяжение аддитивно сформированных образцов показывают, что механические характеристики при растяжении таких материалов оказываются несколько ниже, чем у литых. Сопоставление полученных свойств аддитивных материалов, исследованных в работе и литых, представлено в табл.1.

Таблица 1

Механические характеристики стали 308LSi

Материал	Деформация растяжения, %	Прочность на разрыв, МПа	Предел текучести, МПа
Литой [2]	Минимум 45	505	215
Образцы, изготовленные по EBDM-технология	24 – 40	390 - 490	150 - 200

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зленко М.А. *Аддитивные технологии в машиностроении*. – М.: ГНЦ РФ ФГУП «НАМИ», 2015. – 220 с.
2. Callister W.D., Rethwisch D.G. *Materials Science and Engineering*. – Wiley, 9th Edition, 2014. – 990 с.

**ВОЗДЕЙСТВИЕ ПЛАЗМЕННОЙ ХИМИКО-ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА СТРУКТУРУ И
ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В СПЛАВЕ 40ХНЮ***Г.У. Ерболатова¹, Е.Л. Никоненко^{2,3}, Н.А. Попова²Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. М.К. Скаков⁴¹Восточно-Казахстанский Государственный технический университет им. Д.Серикбаева,

Казахстан, г. Усть-Каменогорск, ул. Серикбаева, 19, 070010

²Томский государственный архитектурно-строительный университет,

Россия, г. Томск, пл. Соляная, 2, 634003

³Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

⁴Институт физики прочности и материаловедения СО РАН,

Россия, г. Томск, пр. Академический, 2/1, 634021

⁵Национальный ядерный центр Республики Казахстан, г. Курчатов, Казахстан,

ул. Красноармейская, 2, 071100

E-mail: natalya-popova-44@mail.ru**THE STRUCTURE AND PHASE TRANSFORMATIONS IN 0.4C-1CR-1NI-1AL ALLOY AFTER
THERMOCHEMICAL PLASMA TREATMENT**G.U. Erbolatova¹, E.L. Nikonenko^{2,3}, N.A. Popova²Scientific Supervisor: Prof. Dr. M.K. Skakov⁴¹D. Serikbayev East Kazakhstan State Technical University, Kazakhstan, Ust-Kamenogorsk,

Serikbaev Street, 69, 070004

²Tomsk State University of Architecture and Building, Russia, Tomsk, Solyanaya Square, 2, 634003³National Research Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin Avenue, 3, 0634050,⁴National Nuclear Center of the Republic of Kazakhstan, Kazakhstan, Kurchatov,

Krasnoarmeiskaya Street, 071100

E-mail: natalya-popova-44@mail.ru

Abstract. *The paper presents the transmission electron microscope investigations of the structure and phase composition of 0.4C-1Cr-1Ni-1Al alloy modified by plasma electrolyte carbonitriding. It is shown that this process leads to substantial changes in the alloy structure. Thus, changes are observed in the alloy phase composition, a set of presenting phases and their morphology, the type of the dislocation structure, and scalar density of dislocation.*

Введение. Одним из способов химико-термической обработки является электролитно-плазменная обработка (ЭПО). Сущность метода ЭПО заключается в нагреве обрабатываемой детали (катода) в водных растворах (электролитах). Упрочнение осуществляется путем периодического нагрева и охлаждения поверхности упрочняемого образца за счет электрического потенциала в слое плазмы, создаваемого между жидким электродом (электролитом) и поверхностью катода (образцом).

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-48-700198

В зависимости от состава электролита ЭПО может представлять цементацию (насыщение поверхности обрабатываемых деталей углеродом с последующим изменением фазового состава и структуры материала), азотирование (насыщение поверхностных слоев изделий в плазме, содержащей азот при пониженном давлении, которая возбуждена электрическим разрядом) и нитроцементацию (поверхностное насыщение стали одновременно углеродом и азотом). Изменяя состав электролита, можно проводить цементацию, азотирование и нитроцементацию с большими скоростями (10-100 мкм/мин), значительно превышающими характерные скорости соответствующих классических процессов.

Целью настоящей работы является исследование закономерностей изменения структуры и фазового состава сплава 40ХНЮ под действием электролитно-плазменной нитроцементации.

Материал и методы исследования. Объектом исследования являлся сплав аустенитного класса 40ХНЮ. Исследования проведено методом просвечивающей дифракционной электронной микроскопии с помощью электронного микроскопа ЭМ-125 при ускоряющем напряжении 125 кВ. Рабочее увеличение в колонне микроскопа выбиралось равным от 8000 до 50000 крат. Изучение образцов проводилось в двух состояниях: 1) до модификации (исходное состояние) и 2) после нитроцементации в приповерхностной зоне образца. Электролитно-плазменная нитроцементация проводилась в водном растворе в течение 5 минут при температуре 700⁰С.

Полученные результаты. Было установлено, что в исходном состоянии матрицей сплава является неупорядоченная ГЦК фаза $Al_{0,7}Cr_{0,3}Ni_3$. Присутствует эта фаза в виде зерен, резко различных по размеру: вдоль границ крупных зерен, составляющих основу материала, располагаются мелкие зерна. Внутри крупных зерен фазы $Al_{0,7}Cr_{0,3}Ni_3$ часто присутствуют выделения других фаз: 1) выделения ОЦК фазы NiAl; 2) выделения ГЦК фазы $AlCrNi_2$; 3) выделения двух фаз NiAl и $AlCrNi_2$.

Фаза NiAl присутствует только внутри зерен $Al_{0,7}Cr_{0,3}Ni_3$ в виде параллельных пластин правильной формы и практически одинаковой ширины в пределах одного зерна.

Фаза $AlCrNi_2$ присутствует в различных вариантах: 1) внутри зерен $Al_{0,7}Cr_{0,3}Ni_3$ вместе с пластинчатыми выделениями NiAl; 2) в виде зерен внутри матричных зерен $Al_{0,7}Cr_{0,3}Ni_3$; 3) в виде отдельно расположенных однофазных зерен. Нередко на границах таких зерен находятся частицы карбида $Cr_{23}C_6$. Иногда зерна фазы $AlCrNi_2$ располагаются группами.

Изображение структуры сплава 40ХНЮ в исходном состоянии приведено на рис. 1.

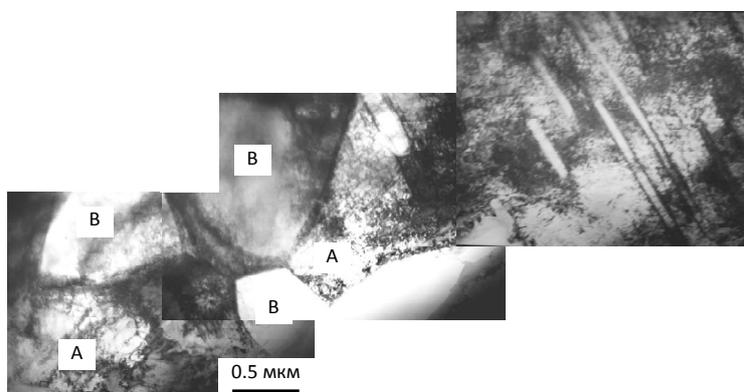


Рис. 1. Электронно-микроскопическое изображение участка структуры, содержащий зерна различных фаз: А – зерна фазы $Al_{0,7}Cr_{0,3}Ni_3$, В – зерна фазы $AlCrNi_2$. Исходное состояние сплава 40ХНЮ

В исходном состоянии в разных зернах $Al_{0.7}Cr_{0.3}Ni_3$ была сформирована дислокационная субструктура разных типов: в двухфазных зернах с пластинчатыми выделениями фазы NiAl – хаотическая и сетчатая субструктура; в однофазных и двухфазных с зернами фазы AlCrNi₂ – ячеисто-сетчатая; в трехфазных зернах – фрагментированная. В зернах фазы AlCrNi₂ дислокации образуют дислокационные сетки. Величина скалярной плотности дислокаций в зернах всех фаз имеет практически равное значение ($\sim 3,0 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$).

Электролитно-плазменная нитроцементация сплава 40ХНЮ не привела к кардинальным изменениям в структуре – по-прежнему сплав 40ХНЮ остается многофазной смесью, состоящей из крупных и мелких зерен. По-прежнему в сплаве присутствуют фазы $Al_{0.7}Cr_{0.3}Ni_3$, AlCrNi₂ и NiAl. Тем не менее, изменения в структуре все же произошли и довольно существенные: изменился фазовый состав и список присутствующих фаз, а также их морфология. Было установлено, что твердые растворы $Al_{0.7}Cr_{0.3}Ni_3$ и AlCrNi₂ отличаются неоднородностью по концентрации. Об этом свидетельствуют нарушения дифракционных картин, полученных с соответствующих участков структуры. Во-первых, вблизи основных рефлексов фаз $Al_{0.7}Cr_{0.3}Ni_3$ и AlCrNi₂ на микродифракционных картинах появляются сателлиты, что свидетельствует о микрорасслоении твердого раствора. Помимо микрорасслоения твердого раствора присутствует мезорасслоение, где волны неоднородности структуры простираются на расстояния порядка нескольких микрометров. Поэтому в одних участках образца сателлиты присутствуют, в других – нет. Во-вторых, у основных рефлексов фаз $Al_{0.7}Cr_{0.3}Ni_3$ и AlCrNi₂ на микродифракционных картинах, обнаруживаются тяжи, что также свидетельствует о неоднородности твердых растворов. В-третьих, характерный контраст на изображении типа «соль-перец», который переходит в контраст наноразмерной фазы Cr₂N. Изображение структуры приповерхностной зоны сплава 40ХНЮ после электролитно-плазменной нитроцементации приведено на рис.2.

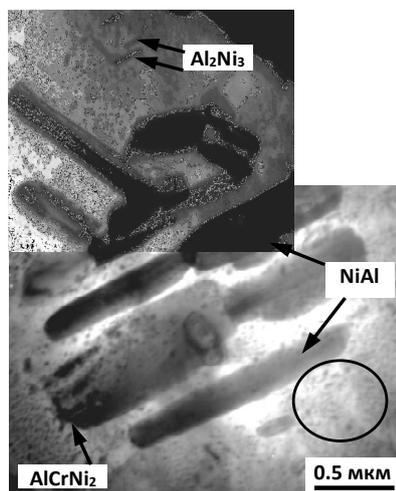


Рис.2. Изображение сплава 40ХНЮ после электролитно-плазменной нитроцементации. Приповерхностная зона образца (окружность отмечена группой частиц Cr₂N)

Электролитно-плазменная нитроцементация привела к тому, что в приповерхностной зоне образца во всех зернах фазы $Al_{0.7}Cr_{0.3}Ni_3$ присутствуют только хаотически распределенные дислокации. Величина скалярной плотности во всех зернах практически одинакова и существенно меньше по сравнению с исходным состоянием материала ($\sim 1,0 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$). В зернах фазы AlCrNi₂ тип дислокационной субструктуры не изменился, а её величина незначительно уменьшилась ($2,3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$).

Заключение. В результате проведенных исследований установлено, что электролитно-плазменная нитроцементация сплава 40ХНЮ привела к изменению: 1) фазового состава и списка присутствующих фаз – произошло выделение нитрида хрома Cr₂N; 2) морфологии фаз; 3) формированию однотипной дислокационной субструктуры в зернах фазы $Al_{0.7}Cr_{0.3}Ni_3$ и к уменьшению в них скалярной плотности дислокаций практически в 3 раза, при этом в зернах фазы AlCrNi₂ не изменился ни тип дислокационной субструктуры, ни величина скалярной плотности дислокаций.

**ОСОБЕННОСТИ ПРОЯВЛЕНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СВОЙСТВ В [001]-
МОНОКРИСТАЛЛАХ CoNiAl, СОСТАРЕННЫХ В МАРТЕНСИТЕ**

А.С. Ефтифеева, Э.И. Янушоните

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. Е.Ю. Панченко

Национальный исследовательский Томский государственный университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050

E-mail: anna_eftifeeva@rambler.ru

**THE FUNCTIONAL PROPERTIES IN STRESS-ASSISTED MARTENSITE AGED CoNiAl [001]-
ORIENTED SINGLE CRYSTALS**

A.S. Eftifeeva, E.I. Yanushonite

Scientific Supervisor: Prof., Dr. E.Yu. Panchenko

National Research Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050

E-mail: anna_eftifeeva@rambler.ru

Abstract. *It has been experimentally shown that the internal tensile stress fields $\sigma_G=65$ MPa are created by stress-induced martensite aging of ferromagnetic $Co_{35}Ni_{35}Al_{30}$ single crystals. Internal stress fields create two-way shape memory effect with a giant reversible tensile strain of up to $+7.3(\pm 0.3)$ % with high cyclic stability during stress-free cooling/heating cycles.*

Введение. Ферромагнитные сплавы CoNiAl с термоупругими B2-L1₀ мартенситными превращениями (МП) активно исследуются последние годы. Интерес к сплавам CoNiAl вызван возможностью вариации температур МП в широких пределах, способностью материала к высокотемпературной сверхэластичности, отсутствием охрупчивания при выделении пластичной γ -фазы в B2-марице и к тому же, в их состав не входят дорогие легирующие элементы [1, 2]. Они имеют уникальную способность испытывать гигантские обратимые деформации до 3,3 % как под действием механических напряжений, так и магнитного поля [3]. Одними из основных факторов, сдерживающих широкое практическое применение этих материалов в качестве приводов и исполнительных устройств многократного действия, является низкая циклическая стабильность двустороннего эффекта памяти формы (ДЭПФ) и небольшая обратимая деформация при ДЭПФ (не более 1/2 от теоретически рассчитанной деформации превращения $\epsilon_{ДЭПФ}=0,5 \cdot \epsilon_0$). Целью данного исследования является изучение ЭПФ, ДЭПФ и влияния термоциклирования на стабильность ДЭПФ в монокристаллах ферромагнитного сплава $Co_{35}Ni_{35}Al_{30}$ после старения под нагрузкой в мартенситном состоянии.

Материалы и методы исследования. В работе исследованы монокристаллы ферромагнитного сплава $Co_{35}Ni_{35}Al_{30}$ (ат. %), выращенные методом Бриджмена. Образцы в форме прямоугольных параллелепипедов с площадью поперечного сечения 9 мм² и высотой 6 мм, вырезаны так, чтобы направления кристаллографических осей [001]_{B2} и [110]_{B2} были взаимно перпендикулярны. Термомеханическая обработка образцов заключалась в гомогенизации при 1623 К, 8,5 ч с последующей закалкой в воду комнатной температуры и старении под нагрузкой в мартенсите – образец выдерживали при 400 К, 1,0 ч в мартенситном состоянии под сжимающей нагрузкой 500 МПа, приложенной вдоль [110]_{B2}-направления. Затем проводили исследование функциональных свойств вдоль [001]_{B2}-направления

состаренных в мартенсите монокристаллов на установке ИМРС – 1 для измерения деформации при растяжении/сжатии во время охлаждения/нагрева в интервале 77 – 573 К под постоянной нагрузкой с выводом кривых деформации от температуры на компьютер. Согласно [4], теоретическая деформация ε_0 для исследуемого $[001]_{B2}$ -направления при $B2-L1_0$ МП при деформации сжатием равна -4.6% и растяжением $+9.6\%$.

Результаты. На рис. 1 показаны результаты исследования ЭПФ и ДЭПФ в состаренных в мартенситном состоянии монокристаллах – зависимость обратимой деформации ε от величины внешних напряжений $\sigma_{\text{вн}}$, приложенных вдоль $[001]_{B2}$ -направления и кривые деформации от температуры $\varepsilon(T)$.

При минимальном внешнем напряжении $\sigma_{\text{вн}}=1$ МПа, необходимом для закрепления образца в захватах установки, наблюдается ДЭПФ – образец самопроизвольно увеличивает размеры при охлаждении и восстанавливает исходный размер при нагреве (рис. 1). Видно, что кривая $\varepsilon(T)$ при $\sigma_{\text{вн}}=1$ МПа имеет стадийность. На первой стадии $280\text{ К} < T < 333\text{ К}$ превращение имеет взрывоподобный характер, т.е. температуры начала и конца перехода равны и, соответственно, имеют значения $M_{s1}=M_l=280\text{ К}$ для прямого МП и $A_{s1}=328\text{ К}$ и $A_l=333\text{ К}$ для обратного МП. Обратимая деформация на первой стадии равна $\varepsilon_{\text{ДЭПФ1}}=+4.9\%$ и превращение сопровождается рассеянием энергии с величиной температурного гистерезиса $\Delta T=50\text{ К}$. Далее скорость превращения резко уменьшается и МП на второй стадии $T < 280\text{ К}$ развивается в широком температурном интервале 141 К. Суммарная обратимая растягивающая деформация ДЭПФ на двух стадиях равна $\varepsilon_{\text{ДЭПФ}}=+7.3(\pm 0.3)\%$, что составляет $\varepsilon_{\text{ДЭПФ}}=0.8 \cdot \varepsilon_0$ при растяжении.

При охлаждении/нагреве под нагрузкой наблюдается ЭПФ. С увеличением сжимающей нагрузки $\sigma_{\text{вн}}$ стадийность на кривых $\varepsilon(T)$ исчезает и растягивающая обратимая деформация при ЭПФ линейно уменьшается (рис. 1). При $\sigma_{\text{вн}}=65$ МПа при охлаждении/нагреве кривая $\varepsilon(T)$ не наблюдается, т.к. образец не испытывает превращения $\varepsilon_{\text{ЭПФ}}=0$. Дальнейшее увеличение напряжений $\sigma_{\text{вн}}$ приводит к появлению обратимой деформации, которая увеличивается с ростом $\sigma_{\text{вн}}$. Обратимая деформация при $\sigma_{\text{вн}} > 65$ МПа становится сжимающей – под нагрузкой при охлаждении образец уменьшается и обратимо восстанавливается при нагреве. Максимальная обратимая деформация при действии внешних напряжений равна $\varepsilon_{\text{ЭПФ}}=-3.1(\pm 0.3)\%$, что составляет $\varepsilon_{\text{ДЭПФ}}=0.7 \cdot \varepsilon_0$ при сжатии.

Наведение ДЭПФ и смена знака ЭПФ вызваны внутренними дальнедействующими полями напряжений σ_G , которые возникают в монокристаллах после старения в мартенситном состоянии. Из анализа зависимости $\varepsilon(\sigma_{\text{вн}})$ видно, что внутренние напряжения σ_G являются растягивающими, т.к. размер образца во время охлаждения при минимальном напряжении увеличивается. Приложение внешних сжимающих напряжений компенсирует действие внутренних растягивающих, поэтому обратимая растягивающая деформация уменьшается с ростом $\sigma_{\text{вн}}$. Отсутствие петли гистерезиса на кривой $\varepsilon(T)$ при $\sigma_{\text{вн}}=65$ МПа, говорит о том, что противоположно направленные внутренние и внешние напряжения уравновешивают друг друга. И наконец, под действием внешних сжимающих напряжений при $\sigma_{\text{вн}} > 65$ МПа, превышающие внутренние σ_G , образец во время охлаждения уменьшается.

Циклическая стабильность ДЭПФ была исследована при минимальном напряжении $\sigma_{\text{вн}}=1$ МПа в циклах охлаждения/нагрев. Зависимость обратимой деформации $\varepsilon_{\text{ДЭПФ}}$, температуры начала прямого МП M_s и температурного гистерезиса ΔT от числа циклов n представлены на рис. 2. Полученные при термоциклировании кривые $\varepsilon(T)$ практически накладываются друг на друга. Сравнение кривых $\varepsilon(T)$ в циклах $n=1$ и $n=100$ показало небольшую разницу. В 100 цикле деформация $\varepsilon_{\text{ДЭПФ}}$ увеличивается на 0,7

%, температура M_s – на 7 К, а гистерезис уменьшается на 7 К по сравнению с 1 циклом. Таким образом, показано, что термоциклирование не разрушает внутренние напряжения, сформированные во время старения в мартенситном состоянии, поэтому количество циклов несущественно влияет ДЭПФ.

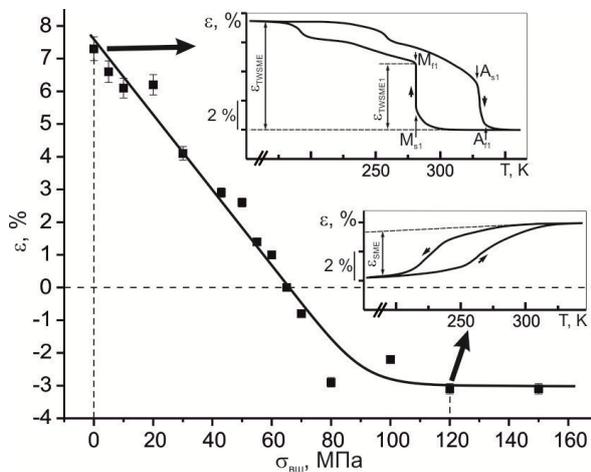


Рис. 1. Зависимость $\varepsilon(\sigma_{внн})$ и кривые $\varepsilon(T)$ при $\sigma_{внн}=1$ МПа и $\sigma_{внн}=120$ МПа для состаренных в мартенсите монокристаллов $Co_{35}Ni_{35}Al_{30}$ с осью деформации вдоль $[001]_{B2}$ -направления

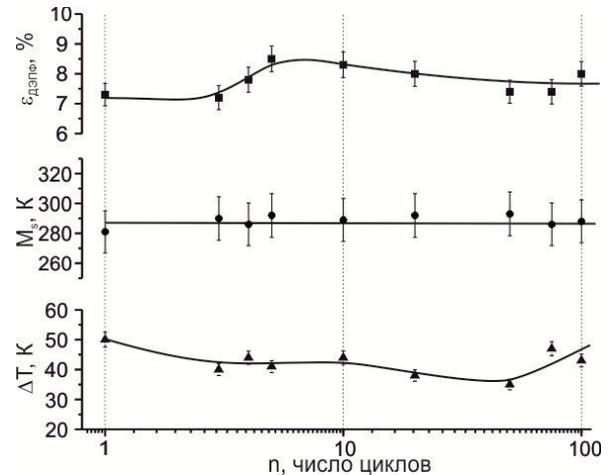


Рис. 2. Зависимости $\varepsilon_{ДЭПФ}(n)$, $M_s(n)$ и $\Delta T(n)$ для состаренных в мартенсите монокристаллов $Co_{35}Ni_{35}Al_{30}$ с осью деформации вдоль $[001]_{B2}$ -направления

Заключение. Экспериментально показано, что с помощью старения в мартенситном состоянии в монокристаллах ферромагнитного сплава $Co_{35}Ni_{35}Al_{30}$ созданы внутренние растягивающие напряжения $\sigma_G=65$ МПа, которые способствуют наведению гигантского ДЭПФ $\varepsilon_{ДЭПФ}=+7,3$ % с высокой циклической стабильностью.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 16-08-00179.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chumlyakov Yu.I., Panchenko E.Yu., Ovsyannikov A.V., Chusov S.A., Kirillov V.A., Karaman I., Maier H. High-temperature superelasticity and the shape-memory effect in $[001]$ Co-Ni-Al single crystals // The Physics of Metals and Metallography. – 2009. – V. 107. – P. 194–205.
2. Tanaka Y., Oikawa K., Sutou Y., Omori T., Kainuma R., Ishida K. Martensitic transition and superelasticity of Co-Ni-Al ferromagnetic shape memory alloys with $\beta+\gamma$ two-phase structure // Mater. Sci. Eng., A. – 2006. – V. 438–440. – P. 1054–1060.
3. Morito H., Oikawa K., Fujita A., Fukamichi K., Kainuma R., Ishida K. Large magnetic-field-induced strain in CoNiAl single-variant ferromagnetic shape memory alloy // Scripta Mater. – 2010. – V. 63. – P. 379–382.
4. Karaca H.E., Karaman I., Chumlyakov Y.I., Lagoudas D.C., Zhang X. Compressive response of a single crystalline CoNiAl shape memory alloy // Scripta Mater. – 2004. – V. 51. – P. 261–266.

**ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ И НАКОПЛЕНИЕ ВОДОРОДА В ЦИРКОНИЕВОМ СПЛАВЕ,
ПОДВЕРГНУТОМ ПЛАЗМЕННО-ИММЕРСИОННОЙ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ ТИТАНА**С.А. Захарченко

Научный руководитель: ассистент, Е.Б. Кашкаров

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: saz7@tpu.ru**INTERACTION AND ACCUMULATION OF HYDROGEN IN THE ZIRCONIUM ALLOY
SUBJECTED TO PLASMA-IMMERSION ION TYPE IMPLANTATION**S.A. Zakharchenko

Scientific Supervisor: research assistant, E.B. Kashkarov

National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia, Lenin avenue 30, 634050

E-mail: saz7@tpu.ru

***Abstract.** In this paper we measured the rate of hydrogen absorption by Zr-1Nb zirconium alloy samples with surface-doped titanium. Hydrogenation of samples was carried out at different temperatures of 360 °C, 400 °C, 450 °C, 800 °C and constant hydrogen pressure in the chamber of 2 atm. A significant change in the rate of hydrogen absorption with increasing temperature from 360 to 400 °C, caused by the destruction of the oxide film and hydrogen embrittlement of the zirconium alloy, is shown.*

Введение. Конструкционным материалом для изготовления оболочек тепловыделяющих элементов (ТВЭЛ) реакторов типа ВВЭР является сплав Zr-1%Nb (КТЦ-110, Э110). В процессе эксплуатации в реакторе оболочки ТВЭЛ подвержены наводороживанию. В результате взаимодействия с водой или паром при высоких температурах наружная поверхность оболочки окисляется, и образующийся атомарный водород растворяется в оболочке. При достижении критической абсолютной или локальной концентрации водорода в сплаве, образуются гидриды, что представляет опасность с точки зрения возможного гидридного растрескивания и повреждения оболочки ТВЭЛ. Перспективным методом защиты оболочек ТВЭЛ является ионная имплантация [1].

Плазменно-иммерсионная ионная имплантация (ПИИИ) представляет собой процесс, в котором интенсивное отрицательное импульсное смещение применяется к материалу мишени, который погружен в плазму, что приводит к тому, что положительно заряженные ионы ускоряются до поверхности мишени при очень высоких скоростях. Ускоренные ионы проникают в кристаллическую структуру материала мишени, что приводит к изменению химического состава и микроструктуры мишени [2]. Было показано, что имплантация титана улучшает окислительное и коррозионное поведение циркония [3, 4]. Имплантация титана может быть использована для защиты оболочек ТВЭЛ, так как титан имеет низкое сечение захвата тепловых нейтронов и повышает механические свойства поверхности циркониевых сплавов.

Материалы и методы исследования. Имплантация титана в мишень из циркониевого сплава Zr-1%Nb проводили методом ПИИИ с использованием установки «Радуга-Спектр». Образцы с фиксированным размером 20×20×0.5 мм предварительно шлифовались до средней шероховатости R_a

0,045 мкм. Остаточное давление в камере составляло $2,5 \times 10^{-3}$ Па. Непосредственно перед имплантацией, проводилась ионная очистка поверхности образцов в плазме тлеющего разряда (аргона) при напряжении 1500 В в течение 5 мин. В качестве материала катода использовался титан марки BT1-00 (99,95 %). Параметры имплантации: давление в камере 0,17 Па (аргон), ток дуги 70 А, напряжение смещения 1500 В, время имплантации 15 мин.

Гидрирование образцов проводилось на автоматизированном комплексе Gas Reaction Controller при разной температуре 360 °С, 400 °С, 450 °С, 800 °С, давлении водорода в камере 2 атм. до концентрации 700 ppm. Изучение элементного состава образцов проводилось с помощью оптической спектроскопии плазмы тлеющего разряда (GD-OES) с использованием установки GD-Profilер 2 фирмы Horiba. Рентгеноструктурный анализ был проведен на дифрактометре Shimadzu XRD-7000 (излучение CuK α).

Описание результатов и обсуждение. На рисунке 1а представлен график скорости поглощения водорода образцами циркониевого сплава Zr-1%Nb имплантированными титаном. Как видно из графика, модификация поверхности позволяет существенно снизить скорость поглощения водорода образцами циркониевого сплава Zr-1%Nb. Кроме того, при увеличении температуры наводороживания наблюдается увеличение скорости сорбции водорода образцами подвергнутыми ПИИИ от $2,3 \times 10^{-6}$ масс.%/с (350 °С) до $1,2 \times 10^{-3}$ масс.%/с (800 °С). При этом скорость сорбции водорода увеличивается в ~5 раз при повышении температуры от 360 °С до 400 °С. При температуре 800 °С поглощение водорода протекает очень быстро, что объясняется не только повышением скорости диффузии водорода, но и фазовым состоянием материала. При 800 °С из анализа фазовой диаграммы Zr-H, при насыщении водородом происходит быстрое растворение водорода в α -фазе с образованием β -фазы циркония, предел растворимости в которой составляет порядка 1 масс.%.

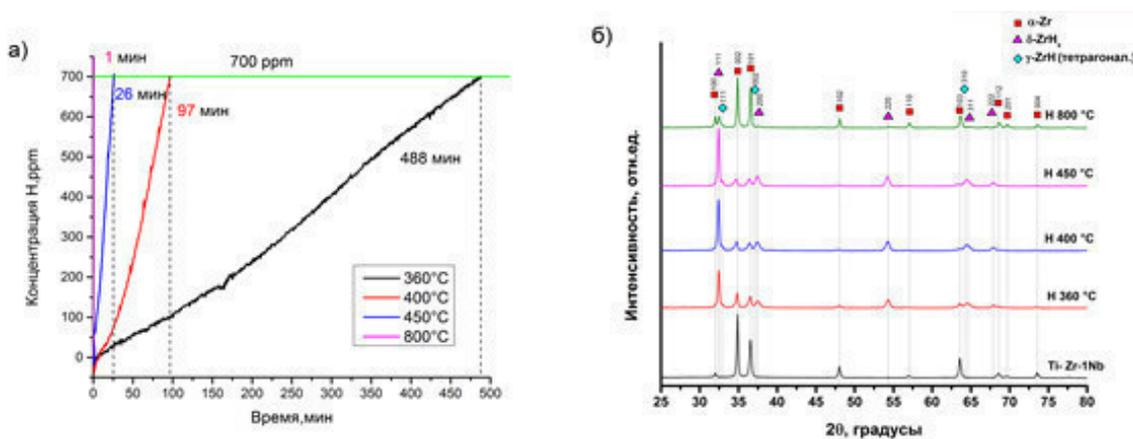


Рис. 1. а- График сорбции водорода образцами циркониевого сплава Zr-1Nb имплантированные титаном
б. – Рентгеновские дифрактограммы циркониевого сплава Zr- 1Nb после ПИИИ и наводороживания

Результаты рентгеноструктурного анализа образцов до и после наводороживания представлены на рисунке 1б. Анализ рентгенограммы модифицированного сплава до наводороживания показал наличие только α -Zr фазы циркония с соотношением параметров решетки $c/a=1,596$. В образцах, насыщенных водородом при температурах 360–450 °С помимо α -фазы, также наблюдаются кубическая фаза δ -ZrH $_2$, содержание которой увеличивается с температурой, и переходная метастабильная тетрагональная фаза γ -ZrH. Содержание последней уменьшается от 2% до 1,4 % с ростом температуры наводороживания. После

насыщения водородом при 800 °С формируется только кубическая фаза δ -ZrH₂, при этом содержание фазы α -Zr составляет 64 %. Стоит отметить, что с увеличением температуры наводороживания от 360 до 450 °С, содержание фазы δ -ZrH₂ увеличивалось от 77% до 87 %. Более низкое содержание гидридных фаз в образце наводороженном при 800 °С обусловлено выходом водорода в процессе охлаждения модифицированного сплава.

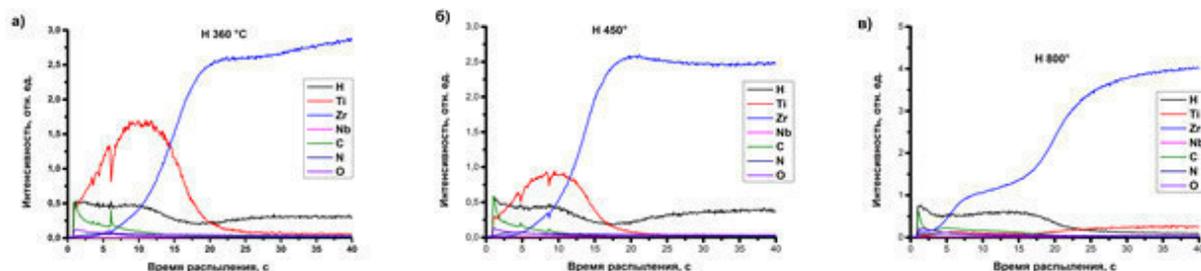


Рис. 2.- Распределение элементов по глубине в сплаве Zr-1%Nb после ПИИИ и наводороживания при температуре: 360 °С (а), 450 °С (б), 800 °С (в)

Из анализа профилей распределения элементов по глубине (рис. 2) видно, что титан имеет неравномерное распределение по глубине, при этом низкая интенсивность Ti и высокая интенсивность C и O на начальном этапе распыления обусловлена поверхностными загрязнениями. После наводороживания при температурах 360–450 °С, водород также имеет градиентное распределение в титансодержащем слое с минимальной концентрацией на границе раздела с основной матрицей циркониевого сплава. В последней водород накапливается в результате диффузии через модифицированный слой. При увеличении температуры наводороживания до 800 °С, титан содержащийся в поверхностном слое диффундирует вглубь циркониевого сплава (рис. 2в). Остаточное содержание водорода в данном образце значительно ниже, чем при наводороживании при меньшей температуре, что может быть обусловлено выходом водорода при охлаждении в вакууме.

Выводы. Титан был имплантирован в сплав Zr-1%Nb методом ПИИИ. Показана зависимость скорости сорбции водорода образцами модифицированного циркониевого сплава от температуры. Различные радиационные дефекты, образовавшиеся при имплантации титана, могут накапливать водород в первую очередь. Когда водород заполняет модифицированный слой, он начинает проникать в объем Zr-1%Nb путем диффузионного процесса.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Glazunov G.P., Azhazha V.M., Baron D. (2009.) The kinetics of hydrogen penetration through the fuel cladding membrane of Zr-1% Nb // Problems of Atomic Science and Technology. V. 4. P.198–2011
2. Dushyant G. (2011). Plasma Immersion Ion Implantation (PIII) Process – Physics and Technology // Intern. Journ. Adv. Technol. V. 2. P. 471–490
3. Peng D.Q., Bai X.D., Pana F., Sun H., Chen B.S. (2006) Influence of titanium ions implantation on corrosion behavior of zirconium in 1 M H₂SO₄ // Appl. Surf. Sci. V. 252. P. 2196–2203
4. Zhanga X.Y., Wan Q., Baib X.D., Jina Z.X. (2006) Effect of Titanium ion implantation on the oxidation behavior of zircalloy-4 at 500 °C // Vacuum. V. 80. P. 1003–1006

**ПОЛУЧЕНИЕ СИСТЕМЫ ИЗ МНОЖЕСТВА ОТДЕЛЬНОСТОЯЩИХ МИКРОКАМЕР ДЛЯ
ДОСТАВКИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВ**

Ю.А. Зыкова, В.Л. Кудрявцева

Научный руководитель: доцент, к.ф.-м.н. С.И. Твердохлебов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: zykova_j@mail.ru

FREE-STANDING MICROCHAMBERS ARRAYS AS A DRUG DELIVERY SYSTEM

U.A. Zykova, V.L. Kudryavtseva

Scientific Supervisor: Assoc. Prof., Dr. Sci. (Phys.-Math.) S.I. Tverdokhlebov

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: zykova_j@mail.ru

***Abstract.** Free-standing individually sealed polylactic acid (PLA) microchamber arrays were produced by microcontact printing. The cargo capacity of each cylindrical-shaped chambers was determined to be $\sim 2,5 \times 10^{-11}$ ml of substance. The successful loading of modal drug substance – water solution fluorescent dye Rhodamine B in system was demonstrated by Confocal Laser Scanning Microscopy.*

Введение. На сегодняшний день интенсивно разрабатывают и исследуют различные системы направленной доставки лекарственных средств (ЛС) в целях улучшения их терапевтической эффективности.

Современные системы доставки ЛС представляют собой частицы, вводимые инъекционно, пленки, пластыри или волокна, которые размещают вблизи терапевтической цели [1, 2]. При этом использование биodeградируемых полимеров для получения систем является привлекательным в виду их способности к полной деградации в организме человека без оказания негативного воздействия [3].

Одной из проблем получаемых систем, является сложность длительного хранения малых гидрофильных молекул в них: возникает преждевременный выход вещества через поры, при этом, в некоторых случаях в большом количестве [1, 4]. Помимо этого, способы, обеспечивающие инкапсуляцию водорастворимых ЛС, требуют длительное время реализации и значительные материальные затраты [3, 5]. Таким образом, получение системы относительно простым методом, способной решать данную проблему, представляет значительный интерес. Предлагаемая для этого система представляет собой пленку микронной толщины, которая может быть введена в организм хирургическим путем в место резекции опухоли или нанесением ее на поверхность имплантатов или сосудистых стентов.

Целью данной работы являлось получение системы доставки гидрофильных лекарственных средств в виде множества отдельностоящих микрокамер из биodeградируемого полимера.

Материалы и методы исследования. Для получения системы предварительно готовили два раствора (2 масс.% и 1 масс%) полимолочной кислоты (ПМК, Ingeo 4044D, NatureWorks LLC, USA) в хлороформе (Fisher Scientific, UK). Полидиметилсалооксановый (ПДМС) штамп, имеющий множество

упорядоченных отдельных микролунок с заданными размерами [6], окунали в раствор полимера на 5 с, извлекали и сушили его на воздухе до полного испарения растворителя. Для определения способности системы инкапсулировать гидрофильные молекулы на ПДМС-штамп/ПМК загружали с помощью пипетки модельное вещество – водный раствор флуоресцентного красителя Родамина В концентрацией 2 мг/мл ($M_w=479,02$ г/моль). ПДМС-штамп/ПМК/РодаминВ помещали в шейкер при 1500 об/мин на 30 с для обеспечения лучшей загрузки вещества. После чего, систему сушили при комнатной температуре до испарения водной фазы. Микроконтактной печатью плоской поверхности со слоем ПМК на ПДМС-штамп/ПМС/Родамин В запечатывали систему, затем ПДМС-штамп удаляли.

Морфологию системы до и после запечатывания исследовали при помощи сканирующей электронной микроскопии (СЭМ, ESEM Quanta 400 FEG, FEI, USA). Наличие загруженного вещества в микрокамерах исследовали при помощи лазерной сканирующей конфокальной микроскопии (ЛСКМ) для родамина в диапазоне длин волн от 415 нм до 691 нм.

Результаты. ПДМС-штамп имеет следующие размеры микролунок: диаметр 6 мкм, глубина 3 мкм, расстояние между центрами двух соседних 20 мкм. Использование 2 масс.% раствора полимера приводит к заполнению микролунок штампа (рис.1 а). При снижении концентрации раствора до 1 масс.% слой ПМК полностью повторяет морфологию поверхности ПДМС-штампа, оставляя при этом пространство в микролунках (рис.1 б). Поэтому в дальнейшем для получения системы использовали раствор ПМК с меньшей концентрацией.

Запечатанная система представляет собой пленку из ПМК с множеством упорядоченных микрокамер в виде цилиндров, являющейся «отпечатком» ПДМС-штампа (рис.1 в). Толщина стенок микрокамер из ПМК $1,0\pm 0,2$ мкм. Вместимость отдельной микрокамеры составляет $\sim 2,5 \times 10^{-11}$ мл.

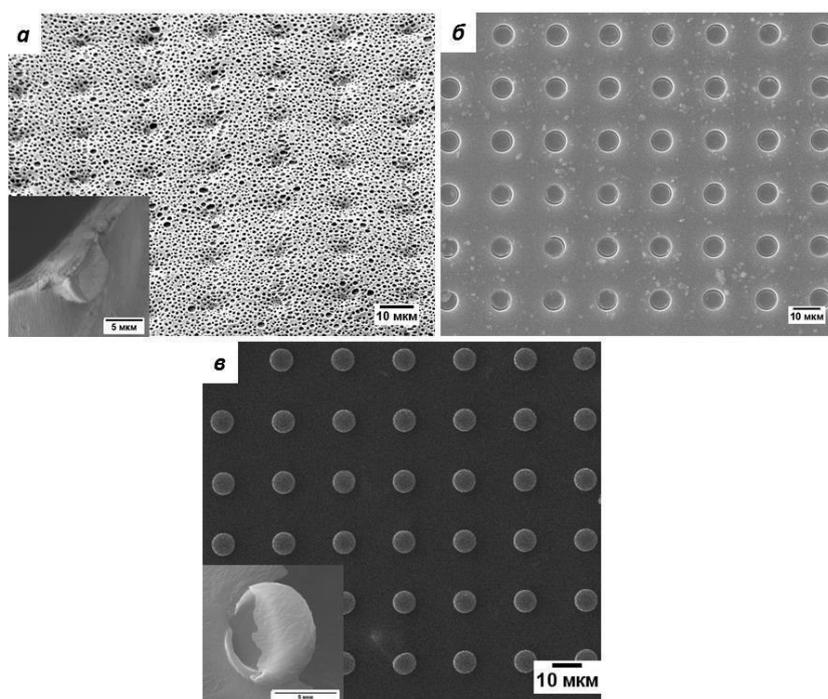


Рис. 1. Изображения на сканирующем электронном микроскопе а) ПДМС-штампа с 2масс.% ПМК; б) ПДМС-штампа с 1масс.% ПМК; в) запечатанной системы из 1масс.% раствора ПМК

Сохранение полостей внутри микрокамер после запечатывания подтверждает успешная загрузка Родамина В (рис.2). При этом краситель не обнаружен вне микрокамер. Это связано с тем, что капли водного раствора, попав на превышающую по площади гидрофобную поверхность, заняли наиболее устойчивое положение – в микрокамерах. Из расчета того, что загруженное модельное вещество полностью заполняет каждую микрокамеру, его количество на 1см^2 полученной системы составляет $1,25 \cdot 10^{-5}$ мг.

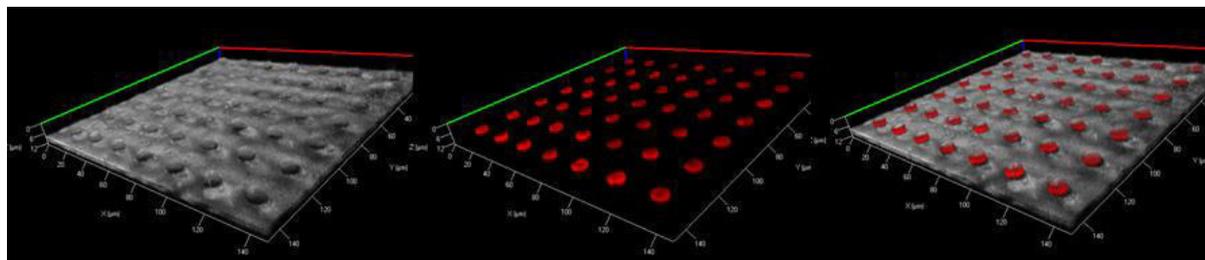


Рис. 2. Изображение запечатанной системы из ПМК с Родамином В, полученное на ЛСКМ по слоям на канале родамина

Выводы. Раствор полимолочной кислоты концентрацией 1масс%. обеспечивает сохранение пространства внутри микрокамер (емкость отдельной $\sim 2,5 \times 10^{-11}$ мл), которое, как было показано на примере модельного вещества, может быть заполнено водорастворимым лекарственным средством.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Byung Kook Lee, Yeonhee Yun, Kinam Park PLA Micro- and Nano-Particles // Advanced Drug Delivery Reviews. – 2016. – Vol.107. – P.176-191.
2. YangChenBo ZhiChenQi LeiWangXuanJinXin DongGuo Fabrication of coated polymer microneedles for transdermal drug delivery // Journal of Controlled Release. – 2017. – Vol.265. – P.14-21.
3. Huayu Tian, Zhaohui Tang, Xiuli Zhuang, Xuesi Chen, Xiabin Jing Biodegradable synthetic polymers: Preparation, functionalization and biomedical application // Progress in Polymer Science. – 2012. – Vol. 31. – P. 237-280.
4. Yusuf Haggag, Yasser Abdel-Wahab, Opeolu Ojo, Mohamed Osman, Sanaa El-Gizawy, Mohamed El-Tanani, Ahmed Faheem, Paul McCarron, Preparation and in vivo evaluation of insulin-loaded biodegradable nanoparticles prepared from diblock copolymers of PLGA and PEG // International Journal of Pharmaceutics. – 2016. – Vol.499. – P.236-246.
5. P. Kainourgios, E.K. Efthimiadou, L.-A. Tziveleka, G.S. Pappas, N. Boukos, G. Kordas Comparative study of LbL and crosslinked pH sensitive PEGylated LbL microspheres: Synthesis, characterization and biological evaluation // Colloids and Surfaces B: Biointerfaces. – 2013. – Vol.104. – P.91-98
6. Meiyu Gai, Johannes Frueh, Tianyi Tao, Arseniy V. Petrov, Vladimir V. Petrov, Evgeniy V. Shestrikov, Sergei I. Tverdokhlebov and Gleb B. Sukhorukov Polylactic acid nano- and microchamber arrays for encapsulation of small hydrophilic molecules featuring drug release via high intensity focused ultrasound // Nanoscale. – 2017. – Vol. 21, №. 9. – P. 7063-7070.

**РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМА И ИССЛЕДОВАНИЕ ИНТЕНСИВНОСТЕЙ
В ПОЛОСЕ ν_2 МОЛЕКУЛЫ $^{34}\text{SO}_2$**

А.Г. Зяtkова

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. Е.С. Бехтерева

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: zyatkova@tpu.ru

**DEVELOPMENT OF THE ALGORITHM AND INVESTIGATION RESEARCH
IN THE BAND ν_2 IN THE $^{34}\text{SO}_2$ MOLECULE**

A.G. Ziatkova

Scientific Supervisor: Prof., Dr. E.S. Bekhtereva

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: zyatkova@tpu.ru

***Abstract.** As a result of the analysis in the experimental spectrum more than 3000 lines belonging to the ν_2 band have been identified and confirmed by the presence of combination differences. On this basis 1500 values of vibrational-rotational energies of state (010) with $J_{\max} = 60$, $K_{\max} = 19$ were determined. In addition to this, on base on the processing of experimental data using the Hartman-Tran profile, the intensities of about 700 individual lines have been determined the first time. Including, the theoretical formulas obtained have been evaluated.*

Введение. Выполненное исследование посвящено исследованию количественных характеристик спектра молекулы $^{34}\text{SO}_2$, полосы ν_2 . Информация о спектрах двуокиси серы и её различных изотопологов является необходимой и значимой во многих как чисто научных, так и прикладных задачах. Исследуемая молекула является одним из наиболее важных компонентов в изучении атмосферы и биосферы Земли, а также атмосферы Венеры, где концентрация диоксида серы в миллионы раз выше, чем в земной атмосфере. В земной атмосфере диоксид серы является естественной составляющей, происходящей из вулканической эмиссии, а также является антропогенным загрязнителем, который оказывает влияние на химические процессы, происходящие в атмосфере. Вследствие вышесказанного в течение многих лет интенсивно выполнялись лабораторные и теоретические исследования для лучшего понимания колебательно-вращательной структуры различных изотопологов двуокиси серы, в том числе и в нашей лаборатории. Для более полного понимания сути процессов происходящих в молекулах необходимо иметь не только информацию о положениях линий, параметрах гамильтониана, но и о таких характеристиках спектральных линий как интенсивности. Как известно, интенсивность - это функция концентрации, давления, температуры и т. д. Знание интенсивностей спектральных линий, позволяет анализировать параметры среды косвенным путем. Перечисленные выше моменты позволяют говорить о важности и **актуальности** анализа спектров высокого разрешения молекулы $^{34}\text{SO}_2$, и извлечения из них высокоточной количественной информации.

Анализ спектра высокого разрешения полосы ν_2 молекулы $^{34}\text{SO}_2$. Молекула $^{34}\text{SO}_2$ является асимметричным волчком со значением параметра асимметрии $\kappa=(2B-A-C)/(A-C) \approx -0.948$. Длина связи S=O равна 1.43 Å, а равновесный угол O=S=O равен 119°. Группа симметрии молекулы $^{34}\text{SO}_2$ изоморфна точечной группе симметрии C_{2v} . В молекуле возможны 3 нормальных колебания: q_1 , q_2 и q_3 (см., например, [1]). При операциях симметрии колебания q_1 (валентное симметричное колебание связи S=O) и q_2 (деформационное симметричное колебание связи O=S=O) преобразуются по неприводимому представлению A_1 . В свою очередь, колебание q_3 (валентное асимметричное колебание связи S=O) обладает симметрией B_1 . Как следствие, в спектрах данной молекулы допускаются два типа полос поглощения: параллельный (или A_1), который соответствует переходу $(\nu_{A_1}) \leftarrow (\nu_{gr})$ и перпендикулярный (или B_1), который обозначает колебательный переход $(\nu_{B_1}) \leftarrow (\nu_{gr})$. Правила отбора для «разрешенных» переходов имеют вид:

$$\Delta J = 0, \pm 1; \Delta K_a = \pm 1; \Delta K_c = \pm 1 - \text{параллельная полоса} \quad (1)$$

$$\Delta J = 0, \pm 1; \Delta K_a = 0; \Delta K_c = \pm 1 - \text{перпендикулярная полоса} \quad (2)$$

Для описания изолированного состояния молекул асимметричного волчка в спектроскопии используют оператор Гамильтона в виде оператора Уотсона в A -редукции и I' представлении, который имеет вид (см., [2]):

$$\begin{aligned} H^v = E^v + & \left[A^v - \frac{1}{2}(B^v + C^v) \right] J_z^2 + \frac{1}{2}(B^v + C^v) J^2 + \frac{1}{2}(B^v - C^v) J_{xy}^2 - \\ & - \Delta_K^v J_z^4 - \Delta_{JK}^v J_z^2 J^2 - \Delta_J^v J^4 - \delta_K^v [J_z^2, J_{xy}^2]_+ - 2\delta_J^v J^2 J_{xy}^2 + \\ & + H_K^v J_z^6 + H_{KJ}^v J_z^4 J^2 + H_{JK}^v J_z^2 J^4 + H_J^v J^6 \dots, \end{aligned} \quad (3)$$

где $A^v, B^v, C^v, \Delta_K^v, \Delta_{JK}^v, \Delta_J^v$ - вращательные параметры и параметры центробежного искажения; E^v - центр полосы, оператор $J_{xy}^2 = J_x^2 - J_y^2, [A, B]_+ = AB + BA$.

Анализ спектра высокого разрешения был выполнен на основе метода комбинационных разностей основного состояния. Полоса ν_2 относится к параллельному типу полосы, так как обладает симметрией A_1 . Центр полосы - 513.5389 cm^{-1} .

Методы исследования интенсивностей спектральных линий. Следующим шагом настоящей работы было определение интенсивностей отдельных линий. Известно [1], что интенсивность колебательно-вращательной линии определяется из соотношения:

$$S_\nu = \frac{8\pi^3 \nu}{4\pi\epsilon_0 3hc} \left[1 - e^{-\frac{h\nu}{kT}} \right] N \frac{g_A}{Z(T)} e^{-\frac{E_A}{kT}} R_A^B, \quad (4)$$

где, $\nu = (E_B - E_A)/hc$ - волновое число перехода, E_A и E_B - колебательно-вращательные энергии нижнего и верхнего состояний; g_A - статистический вес для ядерного спина; $Z(T)$ - статистическая сумма. Значение $R_A^B = \left| \langle A | \mu_z' | B \rangle \right|^2$ - квадрат матричного элемента, так называемого оператора эффективного дипольного момента:

$$\mu_z' = G^+ \mu_z G = G^+ \left[\sum_\alpha k_{z\alpha} \left(\mu_\alpha^e + \sum_\lambda \mu_\alpha^{\lambda} q_\lambda + \sum_{\lambda, \nu \geq \lambda} \mu_\alpha^{\lambda\nu} q_\lambda q_\nu + \dots \right) \right] G, \quad (5)$$

где $|A\rangle$ и $|B\rangle$ - функции нижнего и верхнего колебательно-вращательных состояний. В уравнении (5) μ_z - это z- компонента реального дипольного момента в пространственно-фиксированной системе координат. G – унитарный оператор; $k_{z\alpha}$ - элемент матрицы направляющих косинусов; μ_α^e , μ_α^λ , $\mu_\alpha^{\lambda\nu}$ - параметры дипольного момента, q_λ, q_ν - нормальные координаты. Существует два пути нахождения матричного элемента от дипольного момента. Первый метод основывается на принципе подгонки параметров математической модели к экспериментальным значениям, извлеченных из спектра. Этот способ сопряжен с необходимостью использовать огромные массивы экспериментальных данных. Второй способ включает в себя получение в аналитическом виде параметров математической модели, не требующие знание экспериментальной информации. Основываясь на сказанном, целью данного исследования является подтвердить корректность теоретических формул с помощью высокоточной экспериментальной информации.

Результаты. В результате анализа удалось идентифицировать в экспериментальном спектре более 3000 линий, относящихся к полосе ν_2 и подтвержденных наличием комбинационных разностей. На этой основе были определены 1500 значений колебательно-вращательных энергий состояния (010) с $J^{\text{макс.}}=60$, $K_a^{\text{макс.}}=19$. В том числе, на основе обработки экспериментальных данных с использованием профиля Хартмана-Трана, впервые были определены интенсивности около 700 отдельных линий. В дополнение к этому проведена оценка полученных теоретических формул.

Исследование выполнено при финансовой поддержке грантом РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00116 мол_а.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Flaud J.-M., Camy-Peyret C. Vibration-rotation intensities in H₂O-type molecules application to the $2\nu_2$, ν_1 , and ν_3 bands of H₂¹⁶O // J. Mol. Spectrosc. – 1975. – V. 55. – P. 278–310.
2. Макушкин Ю.С., Улеников О.Н., Чеглоков А.Е. Симметрия и ее применения к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул. – М. Издательство Томского Университета, 1990. – 224 с.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНЫХ СВОЙСТВ ПЛЕНОК
НА ОСНОВЕ ПОЛИМОЛОЧНОЙ КИСЛОТЫ**

Н.М. Иванова, Е.О. Филиппова

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. В.Ф. Пичугин
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050
E-mail: ivanovanina91@mail.ru

RESEARCH OF SURFACE PROPERTIES OF POLYLACTIC ACID FILMS

N.M. Ivanova, E.O. Filippova

Scientific Supervisor: Prof., Dr. V.F. Pichugin
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050
E-mail: ivanovanina91@mail.ru

***Abstract.** This work presents the research results of low-temperature plasma effect of atmospheric pressure on the surface properties of PLA films. Surface modification of the films was carried out using the following parameters: 1 mm thick glass was used as a dielectric, the voltage was 25 kV, the frequency was 5 kHz, the power density was 2 W/cm², the air flow rate was 1 l/min.*

Введение. Полимолочная кислота (ПМК) представляет собой сложный биоразлагаемый, алифатический полиэфир молочной (2-гидроксипропионовой) кислоты и является перспективным полимером для медицинского использования в качестве резобируемого шовного материала, костных пластинок, брюшных сеток, стентов, скаффолдов для регенерации тканей, систем доставки лекарственных средств с контролируемым высвобождением [1]. Особый интерес представляет использование ПМК в качестве кератоимплантата для лечения буллезной кератопатии.

Буллезная кератопатия является тяжелым, прогрессирующим заболеванием роговицы, в основе которого лежит нарушение функционирования эндотелиального слоя, гидратация стромы, и, как следствие, нарушение прозрачности роговой оболочки. В связи с отсутствием сосудов в роговой оболочке, роговица получает питание за счет влаги передней камеры и сосудов перикорнеальной петливой сети, что обуславливает поиск и создание материалов мембранного типа. Одним из основных требований к имплантируемому материалу для лечения данного заболевания является избирательная его проницаемость, способная обеспечивать излишнюю дегидратацию и питание роговой оболочки [2].

Так как поверхность пленок на основе ПМК имеет гидрофобные свойства, то возникает вопрос о модификации материала и снижении значения его краевого угла смачивания, что достигается путем плазменной обработки без изменения объемных свойств полимера [3].

Таким образом, целью данной работы было изучение смачиваемости поверхности пленок ПМК в результате воздействия низкотемпературной плазмой атмосферного давления.

Материалы и методы исследования. Исходное сырье для пленок было получено в результате растворения полимолочной кислоты в трихлорметане (CHCl₃) [4]. Затем раствор в количестве 10 ± 1 г налили в чашку Петри и оставляли до полного испарения растворителя. Толщина пленок составляла 20 мкм.

Модифицирование поверхности проводилось с помощью экспериментальной установки атмосферной низкотемпературной плазмы (ТПУ) барьерного разряда: напряжение 25 кВ, частота – 5 кГц, плотность мощности - 2 Вт/см², температура обрабатываемой плазмой поверхности не превышала 40 °С [5]. Образцы ПМК обрабатывались плазмой 30,60 и 90 сек.

В работе углы смачивания измерялись методом сидячей капли при комнатной температуре (25 ± 2) °С, с помощью прибора KRÜSS Easy Drop DSA 20. В исследовании, использовалось 3 жидкости: две полярные - деионизованная вода (θ_w°), глицерин (θ_g°), и неполярная N-гексан (θ_N°). На образец наносилось по четыре капли воды, объемом 3 мкл. Точность измерения составляла ± 0,1° и проводилось за время менее 5 секунд после осаждения капли.

Полную поверхностную энергию (σ_s) рассчитывали по модели Оуэнса-Вендта [4], как суперпозицию дисперсионной (σ_s^d) и полярной (σ_s^p) составляющих, которые вычислялись методом Оуэнса-Вендта-Рабел-Кэлби (ОВРК) (для полимерных материалов):

$$\frac{\sigma_l \cdot (\cos \theta + 1)}{2\sqrt{\sigma_l^d}} = \frac{\sqrt{\sigma_l^p}}{\sqrt{\sigma_l^d}} \cdot \sqrt{\sigma_s^p} + \sqrt{\sigma_s^d} \quad (1)$$

Полярность пленок из полимолочной кислоты, определялась как доля полярной компоненты в суммарной поверхностной энергии по формуле [4]:

$$p = \sigma_s^p / \sigma_s \quad (2)$$

Результаты. На рисунке 1 приведены изображения капель 3 разнo полярных жидкостей на поверхности пленок. Анализ полученных данных показывает, что исходные пленки обладают углом 80° приближенным к гидрофобным свойствам. Значения поверхностной энергии σ , ее дисперсионной σ^D и поляризационной σ^P составляющих приведенные в таблице 1, показывают, что пленки являются слабополярными полимерами. Однако для лучшего контакта пленок с биологическими тканями образцы должны обладать гидрофильной поверхностью.

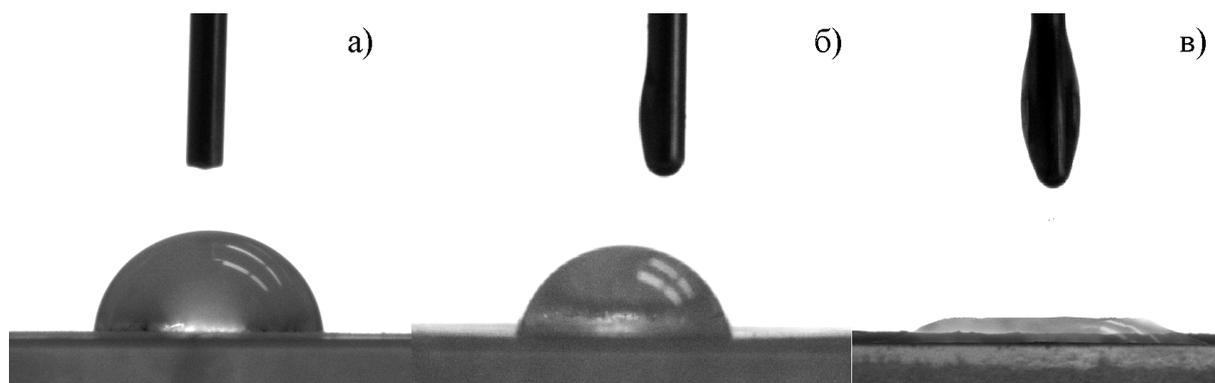


Рис. 1. Изображения капель на поверхности пленки полимолочной кислоты 10гр: а) вода б) глицерин в) N-Гексан

Для улучшения гидрофильных свойств пленок необходимо увеличивать полярную компоненту. Полярность исходных образцов составляет 0,36. В образцах обработанных плазмой наблюдается увеличение поверхностной энергии в 1,5 раза, за счет роста полярной составляющей σ^P . При этом

происходит гидрофилизация поверхности. Это объясняется образованием свободных радикалов на поверхности [6]. Полярность пленок, обработанных плазмой составляет до 0,67.

Таблица 1

Значения краевого угла смачивания (θ_w – вода, θ_g – глицерин, θ_N – N-гексан) и свободной поверхностной энергии (σ) пленок из полимолочной кислоты

Параметры пленок	θ_w , [°]	θ_g , [°]	θ_N , [°]	σ , [мДж/м ²]	σ^D , [мДж/м ²]	σ^P , [мДж/м ²]
Исходный образец 10гр	80,5±1,2	72±2	5±2	26,0±0,8	16,5±0,4	9,5±0,3
Плазма 30сек	56±2	61±2	7±2	40,9±0,7	13,5±0,3	27,5±0,4
Плазма 60сек	55,6±1,5	62±4	3±2	44,5±0,5	17,6±0,3	26,9±0,3
Плазма 90сек	59±4	62±4	6±3	39,4±1,1	16,3±0,5	23,0±0,6

Заключение. Воздействие на поверхность пленок ПМК низкотемпературной атмосферной плазмой приводит к увеличению свободной поверхностной энергии (44,5 ±1,5) мДж/м², а также к уменьшению краевого угла смачивания на 20%, вследствие увеличения полярности поверхности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lopes M. S., Jardini A. L., Maciel Filho R. Poly (lactic acid) production for tissue engineering applications //Procedia Engineering. – 2012. – Т. 42. – С. 1402-1413.
2. Каарова Е. А. и др. Клиническая эффективность персонализированной клеточной терапии заболеваний эндотелия роговицы //Катарактальная и рефракционная хирургия. – 2011. – Т. 11. – №. 2. – С. 45-49.
3. Провоторова, Д. А. Модификация непредельных каучуков в низкотемпературной плазме с целью улучшения их адгезионных свойств / Д. А. Провоторова // Клеи. Герметики. Технологии. – 2013. – № 9. – С. 7 – 9.
4. Кузнецов В. Д. Поверхностная энергия твердых тел. – Гостехиздат, 1954.–С. 220.
5. Алейник, А. Н. Плазменная медицина: Учебное пособие / А. Н. Алейник, Томск: ТПУ. – 2011. – 40 с.
6. Головятинский, С. А. Модификация поверхности полимеров импульсной плазмой атмосферного давления / С. А. Головятинский // Вестник Харьковского университета. – 2004. – № 62. – С. 80 – 86.

**ВЛИЯНИЕ НАПРЯЖЕНИЯ И ДЛИТЕЛЬНОСТИ МИКРОДУГОВОГО ОКСИДИРОВАНИЯ НА
ФИЗИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СТРОНЦИЙ- И КРЕМНИЙ-СОДЕРЖАЩИХ БИОПОКРЫТИЙ**

Я.О. Иващенко¹, Е.Г. Комарова², Е.А. Казанцева¹

Научный руководитель: к.т.н. Е.Г. Комарова²

¹Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, пр. Ленина 36, 634050

²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск, пр. Академический 2/4, 634055

E-mail: yano4ka_97@bk.ru

**INFLUENCE OF MICRO ARC OXIDATION VOLTAGE AND DURATION ON PHYSICAL
CHARACTERISTICS OF STRONTIUM- AND SILICON-CONTAINING BIOCOATINGS**

Y.O. Ivachshenko¹, E.G. Komarova², E.A. Kazanceva¹

Scientific Supervisor: PhD E.G. Komarova²

¹Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050

²Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Russia, Tomsk, 2/4 Academicheskii pr., 634055

E-mail: yano4ka_97@bk.ru

Abstract. *The investigations of physical characteristics of Sr- and Si-containing calcium phosphate coatings formed by micro arc oxidation method under different pulsed voltage 200–370 V for various time were performed. The coating thickness grow by exponential law with increasing of the process duration, but the coating roughness and apparent density do not vary, in this case. The increase in the process voltage leads to the linear increase in the coating thickness and roughness from 55 to 150 μm and from 3.2 to 8.8 μm, respectively.*

Введение. В настоящее время в науке и медицине возрастает интерес к увеличению качества и продолжительности жизни человека. Данная проблема может быть решена путем создания новых имплантационных биоматериалов для замены поврежденных или отсутствующих органов человека. На сегодняшний день самыми распространенными материалами для изготовления имплантатов являются титан и его сплавы благодаря их уникальной совокупности показателей по биохимической и биомеханической совместимости с костной тканью. Эти свойства могут быть улучшены путем создания на их поверхности биоактивных покрытий на основе фосфатов кальция. Перспективным методом является метод микродугового оксидирования (МДО), который позволяет получать покрытия с широким спектром физико-химических свойств, различной степенью кристалличности, толщины, шероховатости и пористости [1]. Варьируя электрофизические параметры МДО и изменяя состав электролита, можно управлять свойствами, структурой и составом формируемых покрытий. Введение в состав электролита гидроксиапатита (ГА), замещенного ионами стронция и кремния обеспечит формирование стронций-кремний-содержащих кальцийфосфатных (Sr-Si-КФ) биопокровтий с высокими остеоиндуктивными свойствами. Известно [2, 3], что ионы Sr и Si способствуют остеогенезу, ускоряют процессы биоминерализации и улучшают метаболическую активность остеобластов.

Целью работы было изучение влияния напряжения и длительности процесса МДО на физические характеристики Sr-Si-КФ покрытий.

Материалы и методы. Нанесение Sr-Si-КФ покрытий проводили методом МДО на установке MicroArc-3.0 на образцы из технически чистого титана марки ВТ1-0 размером 10×10×1 мм³ [2].

В качестве компонентов электролита использовали H_3PO_4 (30% раствор), CaCO_3 (100 г/л) и Sr-Si-замещенный ГА с концентрацией Sr и Si, равной 0,5 моль ($\text{Ca}_{9,5}\text{Sr}_{0,5}(\text{PO}_4)_{5,5}(\text{SiO}_4)_{0,5}(\text{OH})_2$). Нанесение биопокрытий проводили в импульсном анодном режиме при длительности и частоте импульсов, соответственно, 100 мкс и 50 Гц. В работе варьировали импульсное напряжение от 200 до 370 В с шагом 20 В при длительности процесса 10 мин, а также – длительность процесса МДО в интервале 1–10 мин при постоянном напряжении 200 В, на основании ранее выполненных исследований [1,3]. В процессе МДО были сняты осциллограммы и определена плотность импульсного тока, проходящего через поперечное сечение образца, с учетом коэффициента заполнения импульсов по формуле: $j = I/S \times D$, где I – амплитудный ток; S – площадь образца; τ – длительность импульсов; D – коэффициент заполнения. Шероховатость покрытий измеряли на Профилометре-296 по параметру Ra , который определялся как среднее значение шероховатости в пределах нескольких длин участков измерений (ГОСТ 2789-73). Кажущуюся плотность покрытий рассчитывали, как отношение массы покрытия к его объему.

Результаты и обсуждение. На рис. 1 представлены зависимости плотности тока процесса МДО от времени нанесения покрытий при различных величинах импульсного напряжения. Наличие «скачков» на графиках указывает на импульсную природу микроплазменных разрядов, под действием которых происходит транспорт вещества электролита в микродуге и осаждение его в покрытие. С течением времени процесса МДО плотность тока снижается, что обусловлено образованием на поверхности образца покрытия с низкой электропроводностью – диэлектрического КФ слоя. С повышением напряжения происходит увеличение плотности тока, связанное с увеличением интенсивности микродуговых разрядов, приводящих к ускоренному осаждению покрытий. Процесс формирования покрытий можно условно разделить на две стадии. В первой стадии ($t = 0-300$ с) наблюдается интенсивное снижение плотности тока, что может соответствовать высокой скорости роста покрытий под воздействием большого количества короткоживущих микродуговых разрядов, возникающих в результате локализованного электрического пробоя растущего покрытия. Во второй стадии ($t = 300-600$ с) плотность тока принимает минимальные значения и выходит на плато. Мы полагаем, что в этом случае сформированное диэлектрическое покрытие имеет достаточно большую толщину, чтобы препятствовать электрическим пробоям, и рост покрытия замедляется. Измерения толщины покрытий в разный период времени процесса МДО подтвердили данные предположения, поскольку в первой стадии процесса МДО происходил основной рост покрытий (рис. 2а), когда их толщина увеличивалась до 40 мкм. При этом с увеличением длительности процесса МДО до 10 мин толщина покрытий выросла до 50 мкм по экспоненциальному закону: $y = y_0 + A \cdot \exp(R_0 x)$.

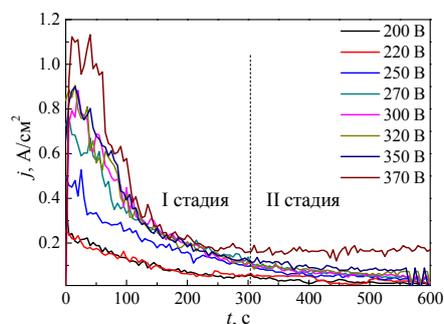


Рис. 1. Зависимости плотности тока от длительности процесса МДО при различных величинах импульсного напряжения

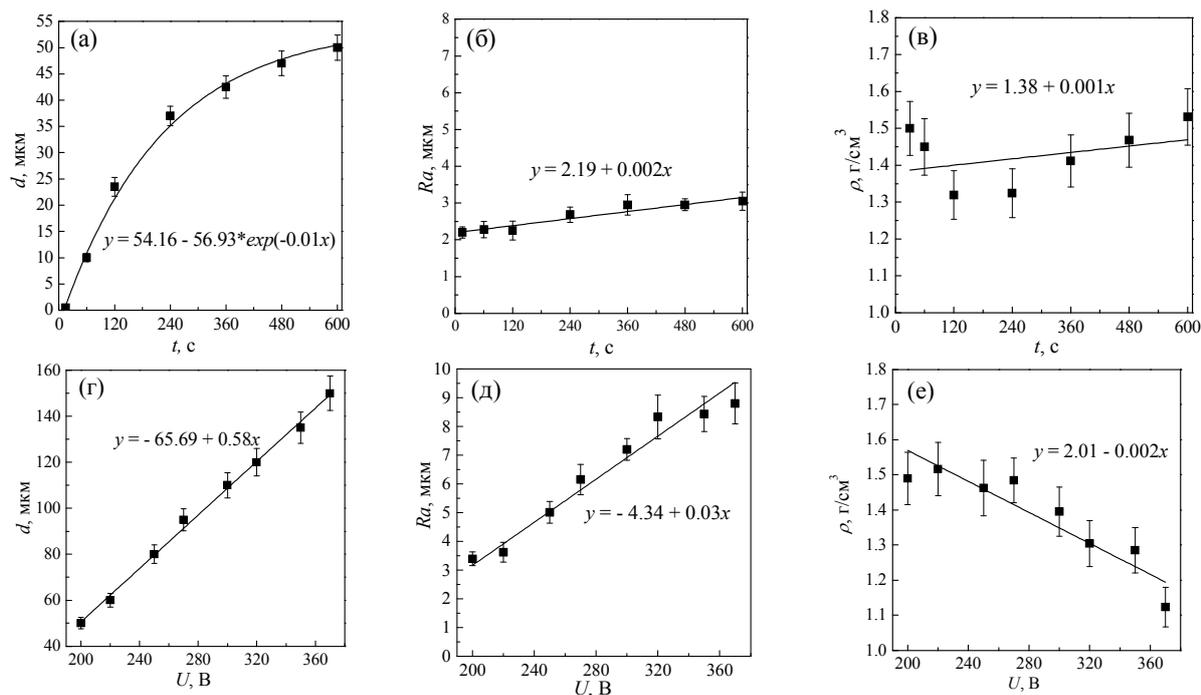


Рис. 2. Зависимости толщины (а, з), шероховатости (б, д) и кажущейся плотности (в, е) Sr-Si-KФ покрытий от длительности процесса МДО (а–в) и величины импульсного напряжения (з–е)

Следует отметить, что при постоянном напряжении 200 В длительность процесса МДО практически не влияет на кажущуюся плотность и шероховатость покрытий, которые составили соответственно $1,4 \pm 0,1$ г/см³ и $2,5 \pm 0,05$ мкм (рис. 2б,в). В то время как повышение импульсного напряжения от 200 до 370 В приводит к линейному увеличению толщины от 55 до 150 мкм и шероховатости по Ra от 3,2 до 8,5 мкм (рис. 2г,д), что обусловлено увеличением интенсивности микродуговых разрядов (рис. 1). Однако, кажущаяся плотность линейно уменьшается от 1,5 до 1,1 г/см³ (рис. 2е), что может быть связано со структурными изменениями в покрытиях. Дальнейшие электронно-микроскопические и рентгеноструктурные исследования позволят более детально объяснить закономерности формирования микроструктуры, морфологии, фазового состава и свойств Sr-Si-KФ покрытий в зависимости от электрофизических параметров процесса МДО.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы фундаментальных научных исследований СО РАН, проект III 23.2.5.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Комарова Е.Г. Закономерности формирования структуры и свойств микродуговых покрытий на основе замещенных гидроксипатитов на сплавах титана и ниобия: дис. ... канд. тех. наук/ Е.Г. Комарова. – Томск, 2017. – 190 с.
2. Медков М.А., Грищенко Д.Н., Руднев В.С., Шулепин И.В., Череповский А.С., Пономаренко А.И., Дюйзен И.В. Особенности остеорепарации при использовании биоматериалов на основе гидроксипатита и стронций-замещенного гидроксипатита // Тихоокеанский медицинский журнал. – 2015. – № 4. – С. 48–52.
3. Комарова Е.Г., Чайкина М.В., Седельникова М.Б., Шаркеев Ю.П., Казанцева Е.А. Изучение физико-химических свойств лантан- и кремний-содержащих кальцийфосфатных покрытий // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2016. – Т. 59. – № 7/2. – С. 113-117.

**ИССЛЕДОВАНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА МОЛЕКУЛЫ $^{34}\text{SO}_2$
ДИАПОЗОНЕ 440-620 CM^{-1}**

И. Инь, А.Г. Зяткова

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. Е.С. Бехтерева

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

e-mail:741276784@qq.com

RO-VIBRATIONAL ANALYSIS OF THE $^{34}\text{SO}_2$ MOLECULE IN REGION OF 440-620 CM^{-1}

Y. Yin, A. Ziatkova

Scientific Supervisor: Prof., Dr. E.S. Bekhtereva

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

e-mail:741276784@qq.com

***Abstract.** Present work is a continuation of our extensive study $^{34}\text{SO}_2$. Ro-vibrational spectrum of the $^{34}\text{SO}_2$ molecule has been recorded in the region of 440–620 cm^{-1} where the ν_2 band is located. The method of Ground State Combination Differences is used for the spectra assignment. Finally more than 600 transitions of b-type belonging to the ν_2 band are founded. A set of 30 parameters is obtained which reproduces the initial 570 infrared ro-vibrational energy values from more than 4100 experimental lines with a root mean square deviation $d_{\text{rms}} = 1.5 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$.*

Введение. Для многих задач науки и техники важным является знание внутренних свойств и фундаментальных характеристик молекул. Методы молекулярной спектроскопии позволяют извлечь из полученной экспериментальной информации структурные постоянные, дипольные моменты молекулы, моменты инерций, параметры силового поля, и энергетическую колебательно-вращательную структуру. Подобного рода информация является чрезвычайно важной при решении многих не только академических, но и прикладных задач физической химии, пищевой технологии, атмосферной оптики и других областей науки.

Объектом исследования данной работы является колебательно-вращательный спектр высокого разрешения молекулы $^{34}\text{SO}_2$. Для исследования молекулы $^{34}\text{SO}_2$, как и для любой другой, важно иметь

точный вид потенциальной функции. Корректная информация о внутримолекулярной потенциальной функции, является необходимой для решения задач касающихся внутренней динамики, процессов, происходящих в молекуле. В Земной атмосфере диоксид серы является естественной составляющей, происходящей из вулканической эмиссии, а также является антропогенным загрязнителем. Отметим, что в реальной смеси газов, например, в атмосферном воздухе, кроме самих молекул, по разным причинам, возникают их изотопологи. Большую роль исследования спектров молекулы $^{34}\text{SO}_2$ и ее изотопологов играет также в астрофизике, планетологии, так как данная молекула и ее изотопологи были обнаружены в атмосферах планет Солнечной системы, а именно, Сатурн, Уран, Нептун. Перечисленные выше моменты позволяют говорить о **важности и актуальности** анализа спектров высокого разрешения молекулы $^{34}\text{SO}_2$ и извлечения из них высокоточной количественной информации. В соответствии с вышесказанным, **целью** данной работы является решение обратной спектроскопической задачи, т.е. получения параметров гамильтониана, на основе экспериментальной информации, извлеченной из спектра.

Метод исследования. Был выполнен анализ спектра высокого разрешения полосы $\nu_2(A_1)$ молекулы $^{34}\text{SO}_2$, центр которой локализован на $440,620 \text{ см}^{-1}$. Вследствие симметрии молекулы для этой полосы разрешены переходы b-типа. Правила отбора имеют вид: $\Delta J = 0, \pm 1$; $\Delta K_a = \pm 1$; $\Delta K_c = \pm 1$. В настоящем исследовании найдены переходы b-типа и включены в решение обратной спектроскопической задачи. В качестве математической модели выбран гамильтониан Уотсона A-редукции и Γ^1 -представлении, описывающий энергетическую структуру молекул типа асимметричного волчка [1]. Фрагмент использованного оператора диагонального блока имеет следующий вид (1):

$$H^{\nu\nu} = E^{\nu} + \left[A^{\nu} - \frac{1}{2}(B^{\nu} + C^{\nu}) \right] J_z^2 + \frac{1}{2}(B^{\nu} + C^{\nu}) J^2 + \frac{1}{2}(B^{\nu} + C^{\nu}) J_{xy}^2 \quad (1)$$

$$- \Delta_K^{\nu} J_z^4 - \Delta_{JK}^{\nu} J_z^2 J^2 - \Delta_K^{\nu} J^4 - \delta_K^{\nu} [J_z^2, J_{xy}^2]_{\pm} - 2\delta_J^{\nu} J^2 J_{xy}^2 + \dots,$$

Экспериментальные детали. При анализе использовался спектр высокого разрешения, зарегистрированный с помощью Фурье спектрометра Bruker IFS 120 (Германия). Эксперимент проводился при давлении 0,62 мбар, в спектральном диапазоне $440\text{-}620 \text{ см}^{-1}$ с разрешением $0,0025 \text{ см}^{-1}$ при комнатной температуре.

В этом спектральном диапазоне локализована одна полоса поглощения, а именно, ν_2 . В качестве иллюстрации на Рис. 1 показан спектр молекулы $^{34}\text{SO}_2$ в диапазоне $440\text{-}620 \text{ см}^{-1}$, а также фрагмент Q-ветви. Как видно, линии хорошо разрешены и имеют четкий контур. Анализ спектра проводился на основе метода комбинационных разностей.

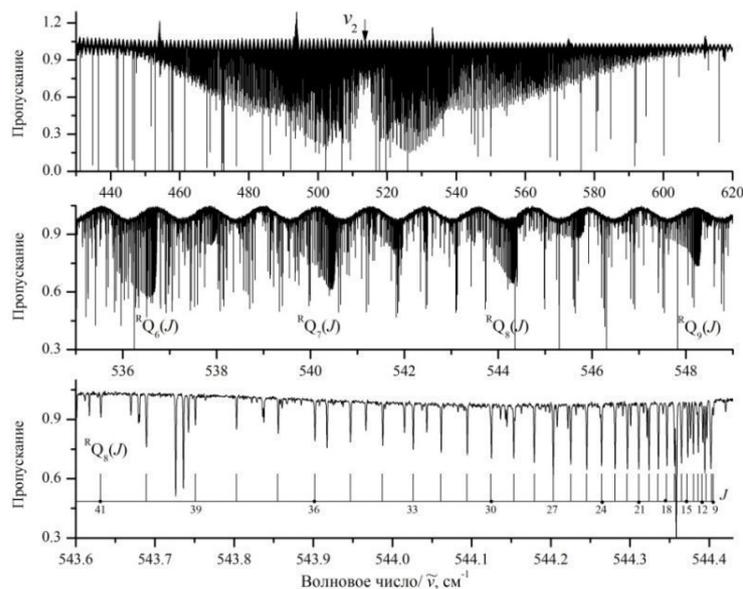


Рис. 1. Активная в инфракрасном поглощении колебательно-вращательная полоса молекулы $^{34}\text{SO}_2$ в области $440\text{-}620\text{ см}^{-1}$

Результаты. На основе анализа экспериментальных данных было определено более 4100 энергетических уровней. В результате решения обратной спектроскопической задачи получено 30 параметров, описывающих вращательную структуру колебательного состояния ($d_{\text{rms}} = 1.5 \cdot 10^{-4}\text{ см}^{-1}$).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Макушкин Ю.С., Улеников О.Н., Чеглоков А.Е. Симметрия и ее применения к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул. – М: Издательство Томского Университета, 1990. – 224 с.

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЗНАЧЕНИЙ ИНДЕКСОВ ХАУНСФИЛДА ОБЪЕКТОВ, ИЗГОТОВЛЕННЫХ
МЕТОДОМ ПОСЛОЙНОГО НАПЛАВЛЕНИЯ С РАЗНЫМИ ПАРАМЕТРАМИ ПЕЧАТИ**

А.А. Исмаилова, М.С. Шкурूपий, Ю.М. Черепенников

Научный руководитель: к.ф.-м.н. С.Г. Стучебров

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: aai40@tpu.ru

**HOUNSFIELD UNITS DETERMINATION OF THE OBJECTS PRODUCED BY FUSED
DEPOSITION MODELING WITH DIFFERENT PRINTING PARAMETERS**

A.A. Ismailova, M.S. Shkurupii, Yu.M. Cherepennikov

Scientific Supervisor: PhD S.G. Stuchebrov

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: aai40@tpu.ru

***Abstract.** The results of the Hounsfield units determination for the objects produced by fused deposition modeling with different printing parameters were presented. The samples of cubic shape were made of SBS plastic with different polymer filling factors. The parameters of the samples were investigated with the help of medical CT scanner.*

Введение. Аддитивные технологии [1] в особенности использующие методы послойного наплавления пластиков [2] нашли применение во многих сферах человеческой деятельности. В число таких направлений вошла медицина. Авторами ведется исследование, направленное на разработку метода проведения экспериментального планирования лучевой терапии, основанного на применении фантомов, имитирующих соответствующие плотности органов и тканей человеческого тела [3]. В данной работе исследуются значения индексов Хаунсфилда объектов, изготовленных методом послойного наплавления с разными параметрами печати. Для этого из СБС пластика были изготовлены 10 объектов кубической формы с разными коэффициентами наполнения полимера (10-100%). С целью определения характеристик полученных образцов, они были исследованы на медицинском компьютерном томографе.

Материалы и методы. В процессе работы 3D-принтера формируются нити расплавленного пластика с заданной толщиной, которые наносятся в форме слоя объекта (Рис. 1). После этого печатающий элемент принтера смещается относительно изготавливаемого объекта вверх на заданное расстояние и создается следующий слой. Печать осуществляется таким образом, что бы направление нанесения нитей в ближайших слоях было перпендикулярно друг другу. Расстояние между центрами нитей в слое d (см. Рис. 1) определяет коэффициент наполнения изготавливаемого объекта пластиком. С увеличением параметра d нити образуют сетку с большими воздушными пустотами.

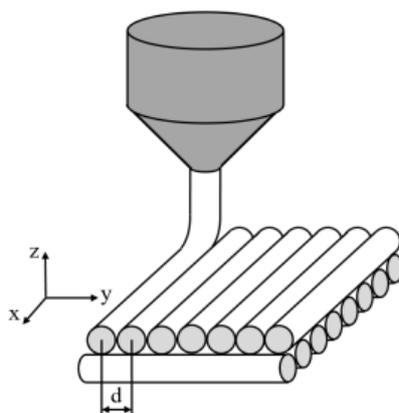


Рис.1. Процесс изготовления изделий методом послойного наплавления

В рамках данной работы были изготовлены образцы кубической формы размером 20x20x20 мм с помощью принтера UP-Plus2 [4]. Толщина нити была равна 0,6 мм, высота слоя – 0,4 мм.

Созданные объекты были исследованы на медицинском компьютерном томографе Siemens Somatom Emotion [5]. Полученные данные были обработаны с помощью программного обеспечения «eFilm».

Результаты и обсуждения. В программе «eFilm» полученные томограммы были представлены в виде контрастных черно-белых изображений. Каждому оттенку серого присваивалось числовое значение, которое соответствовало определенному значению по шкале Хаунсфилда (Hounsfield unit, HU). Томографические исследования проводились при разных ориентациях образцов: ось Y перпендикулярна плоскости реконструкции – ориентация XZ, ось Z перпендикулярна плоскости реконструкции – ориентация XY (см. Рис. 1).

На рисунке 2 представлен пример обработки томографических данных. При помощи встроенного в программное обеспечение инструментария проводилась оценка разброса значений HU в заданных областях.

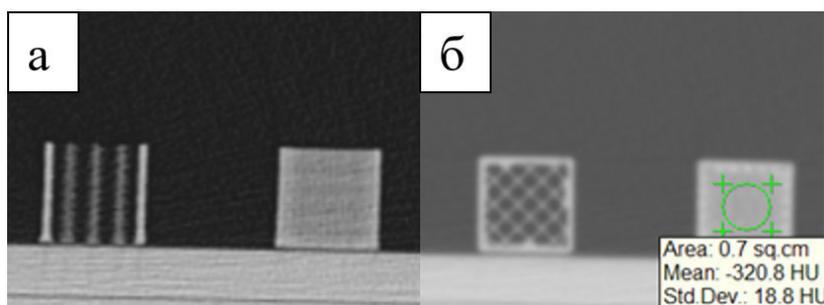


Рис. 2. Процесс обработки данных в программном обеспечении «eFilm»

а – ориентация XZ; б – ориентация XY

На основе обработанных данных была получена зависимость индексов Хаунсфилда от коэффициента наполнения материалом образца. Результаты представлены на рисунке 3. На графики нанесены значения индексов и их разброса.

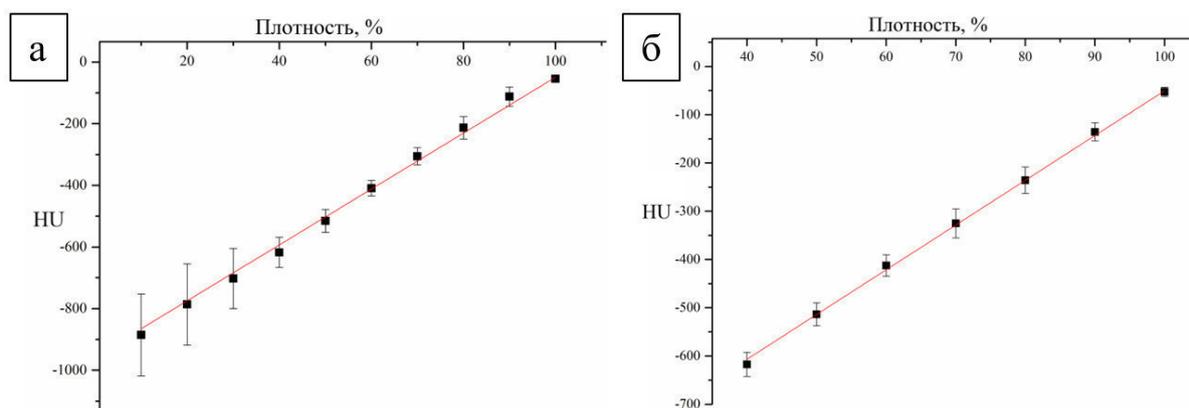


Рис. 3. Зависимость HU-индексов от коэффициента наполнения материалом образца

а – ориентация XZ; б – ориентация XY

Зависимости имеют линейный характер. Видно, что от ориентации образца зависит значение разброса индексов. Это обуславливается разным количеством воздушных зазоров, попадающих в плоскость томографического исследования (см. Рис. 2).

Заключение. В рамках данной работы были получены зависимости значений индексов Хаунсфилда от коэффициента наполнения материалом при трехмерной печати, а также измерены разбросы этих значений для разных ориентаций образцов относительно плоскости томографического сканирования. Полученные результаты показывают, что при помощи используемого в данной работе СБС пластика можно имитировать различные мягкие ткани с плотностью до 0 по шкале Хаунсфилда. Полученные зависимости позволяют точно определить необходимый коэффициент наполнения материалом для получения конкретного значения индекса Хаунсфилда.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Баева Л.С., Маринин А.А. Современные технологии аддитивного изготовления объектов. Вестник Мурманского государственного технического университета // 2014. – Т. 17. – № 1. – С. 7–13.
2. Зотов О.Ю., Фролов Д. А. Особенности метода изготовления изделий путем послойного наплавления материала // Ученый XXI века. – 2016. – № 1.
3. Данилова И.Б., Красных А.А., Милойчикова И.А., Стучебров С.Г. Моделирование взаимодействия гамма-излучения и АБС-пластика с различными металлическими примесями // Вестник Национального исследовательского ядерного университета МИФИ. – 2017 – Т. 6 – №. 1. – С. 78-82
4. 3D принтер UP! Plus 2 [Электронный ресурс] – режим доступа: <http://3dtoday.ru/3d-printers/pp3dp/up-plus-2/>. 12.02.2018.
5. SOMATOM Emotion 16 eco [Электронный ресурс] – режим доступа: <https://www.healthcare.siemens.ru/refurbished-systems-medical-imaging-and-therapy/ecoline-refurbished-systems/computed-tomography-ecoline/somatom-emotion-eco>. 12.02.2018.

**ВЛИЯНИЕ ИМПУЛЬСНОГО НАПРЯЖЕНИЯ НА СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ
В МИКРОДУГОВЫХ ЛАНТАН-КРЕМНИЙ-СОДЕРЖАЩИХ БИОПОКРЫТИЯХ**

Е.А. Казанцева¹, Е.Г. Комарова²

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. Ю.П. Шаркеев²

¹Национальный исследовательский Томский государственный университет,

г. Томск, пр. Ленина 36, 634050

²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск, пр. Академический 2/4, 634055

E-mail: kati10_96@mail.ru

**EFFECT OF PULSED VOLTAGE ON STRUCTURAL PHASE TRANSITIONS IN THE MICRO
ARC LANTANUM-SILICON-INCORPORATED BIOCOATINGS**

Е.А. Kazanceva¹, Е.Г. Komarova²

Scientific Supervisor: Prof., Dr. Yu. P. Sharkeev²

¹Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050

²Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Russia, Tomsk, 2/4 Academicheskii pr., 634055

E-mail: kati10_96@mail.ru

***Abstract.** The investigation of the effect of micro arc oxidation pulsed voltage on microstructure and structural phase transitions in the lanthanum-silicon-incorporated calcium phosphate biocoatings was performed. The biocoatings deposited under 200-250 V have X-ray amorphous structure. The increase of the pulsed voltage from 300 to 350 V leads to the formation of amorphous-nanocrystalline structure in the coatings with volume fraction of crystalline phase to 57 % and incorporation of nanocrystallites of CaHPO_4 , $\beta\text{-Ca}_2\text{P}_2\text{O}_7$ and TiO_2 (anatase) phases.*

Введение. Современные тенденции в области нанесения биоактивных покрытий заключаются в поиске оптимальных параметров покрытий, обеспечивающих наибольшую их биоактивность и успешную остеоинтеграцию с костной тканью. Метод микродугового оксидирования (МДО) хорошо подходит для модификации и функционализации металлических подложек покрытиями на основе фосфатов кальция. Варьируя параметры МДО можно изменять структурно-фазовый и элементный составы, морфологию, шероховатость и прочностные характеристики кальцийфосфатных (КФ) покрытий, определяющие их поведение в организме человека [1]. Модификация КФ покрытий лантаном – элементом, способным замещать ионы Ca^{2+} в биосистемах, и используемом при лечении гиперфосфатемии, и кремнием – ионы которого участвуют в процессе кальцификации молодых костей и оказывают существенное влияние на процесс остеогенеза, может повысить биоактивность покрытий, и улучшить сцепление имплантата с костной тканью [1,2]. **Целью работы** было изучение влияния величины импульсного напряжения МДО на микроструктуру и структурно-фазовый состав лантан-кремний-содержащих КФ (La-Si-КФ) покрытий.

Материалы и методы. Нанесение La-Si-КФ покрытий проводили методом МДО на установке MicroArc-3.0 на образцы из технически чистого титана ВТ1-0 размером $10 \times 10 \times 1$ мм³ [1]. В качестве компонентов электролита использовали H_3PO_4 (30%-ный раствор), CaCO_3 (100 г/л) и La-Si-замещенный гидроксипатит с концентрацией заместителей 0,2 и 0,5 моль $(\text{Ca}_{10-x}\text{La}_x(\text{PO}_4)_{6-x}(\text{SiO}_4)_x(\text{OH})_2)$, $x = 0,2$ и $0,5$, 60

г/л) [1]. Нанесение покрытий проводили в импульсном анодном режиме при следующих параметрах: длительность импульсов – 100 мкс, частота – 50 Гц, время нанесения покрытий – 10 мин, напряжение варьировалось в диапазоне 200-350 В [1]. Рентгенофазовый анализ (РФА) покрытий был выполнен на дифрактометре D8 Advance (BRUKER, ИХТМ СО РАН) в геометрии Брэгга-Брентано в Cu-K α излучении в диапазоне углов $2\theta = 10\text{--}90^\circ$ и шагом сканирования $0,01^\circ$. При расшифровке рентгенограмм и идентификации фаз использовали базу данных JCPDS (Joint Committee on Powder Diffraction Standards). Размеры кристаллитов или области когерентного рассеяния (ОКР) рассчитывали по формуле Шеррера, параметры элементарной ячейки определяли по квадратичной форме для соответствующего типа решетки [3]. Микроструктуру покрытий исследовали методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) на просвечивающем электронном микроскопе JEM-2100 JEOL (ЦКП «Нанотех» ИФПМ СО РАН, г. Томск). Для измерения размеров кристаллитов покрытий применяли стандартный метод «секущей».

Результаты и обсуждение. Исследования методом РФА показали, что La-Si-КФ покрытия с различной концентрацией заместителей, нанесенные при напряжениях процесса 200-250 В, находятся преимущественно в рентгеноаморфном состоянии, о чем свидетельствует диффузное гало на рентгенограммах (рис. 1 а). Также наблюдаются слабые рефлексы от кристаллической фазы α -Ti с гексагональной решеткой (JCPDS стандарт №44-1294), соответствующие материалу подложки.

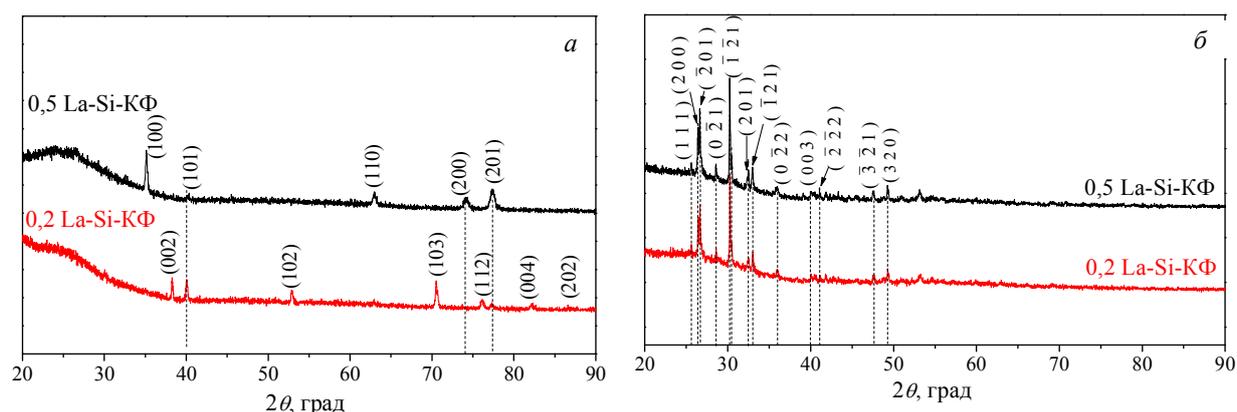


Рис. 1. Рентгенограммы La-Si-КФ покрытий, нанесенных при напряжениях МДО 200 В (а) и 300 В (б)

Повышение напряжения МДО от 300 до 350 В приводит к уменьшению объемной доли аморфной фазы в покрытиях и увеличению кристаллической фазы монетита CaHPO_4 до 57 об.% (рис. 1 б). Формирование подобной аморфно-кристаллической структуры в покрытиях при высоких напряжениях МДО может быть связано с высокими температурами в области микродуговых разрядов, приводящих к рекристаллизации аморфного КФ вещества. Структурные исследования методом РФА [3] показали, что во всех типах покрытий фаза CaHPO_4 имеет триклинную кристаллическую решетку с параметрами элементарной ячейки: $a = 6,918\text{--}6,930 \text{ \AA}$, $b = 6,706\text{--}6,742 \text{ \AA}$, $c = 6,984\text{--}6,995 \text{ \AA}$, $V = 313,1\text{--}315,0 \text{ \AA}^3$, $\alpha = 95,930\text{--}96,175^\circ$, $\beta = 103,846\text{--}103,909^\circ$, $\gamma = 89,350\text{--}89,643^\circ$. В то время как эталонная фаза CaHPO_4 (JCPDS стандарт № 010-89-5969) кристаллизуется в триклинной сингонии с параметрами элементарной ячейки $a = 6,900 \text{ \AA}$, $b = 6,650 \text{ \AA}$, $c = 7,000 \text{ \AA}$. Расчет ОКР [3] показал, что в покрытиях с концентрацией La и Si, равной 0,2 моль, размеры кристаллитов фазы CaHPO_4 в рефлексах, индцированных на рентгенограммах (см. рис. 1 б), варьируются от 24 до 54 нм, и средний размер кристаллитов составляет 41,1 нм, а в покрытиях с концентрацией La и Si, равной 0,5 моль, размеры кристаллитов варьируются от 17 до 75 нм,

и средний размер – составляет 42,4 нм. Таким образом, показано, что покрытия, нанесенные при высоких напряжениях, находятся в аморфно-нанокристаллическом состоянии.

Микроструктурные исследования методом ПЭМ показали, что La-Si-КФ покрытия, нанесенные при напряжениях 200-250 В, имеют аморфную микроструктуру с наличием кристаллитов фазы β - $\text{Ca}_2\text{P}_2\text{O}_7$ размером менее 10 нм в рефлексе (226) (рис 2 а). Биопокрытия, полученные при высоких импульсных напряжениях 300-350 В, имеют аморфно-кристаллическую микроструктуру. Об этом свидетельствуют микродифракционная (МД) картина с наличием многочисленных точечных рефлексов и диффузного гало (рис. 2 б). Индексирование МД картины показало присутствие в La-Si-КФ покрытиях трех фаз: β - $\text{Ca}_2\text{P}_2\text{O}_7$ с тетрагональной решеткой (JCPDS стандарт № 09-0346), CaHPO_4 с триклинной решеткой (JCPDS стандарт № 09-0080) и TiO_2 в модификации анатаз с тетрагональной решеткой (JCPDS стандарт № 21-1272). На темнопольном ПЭМ-изображении (рис. 2 б) в рефлексе (100) фазы CaHPO_4 наблюдаются кристаллиты размером 10–80 нм. Форма всех кристаллитов близка к равноосной.

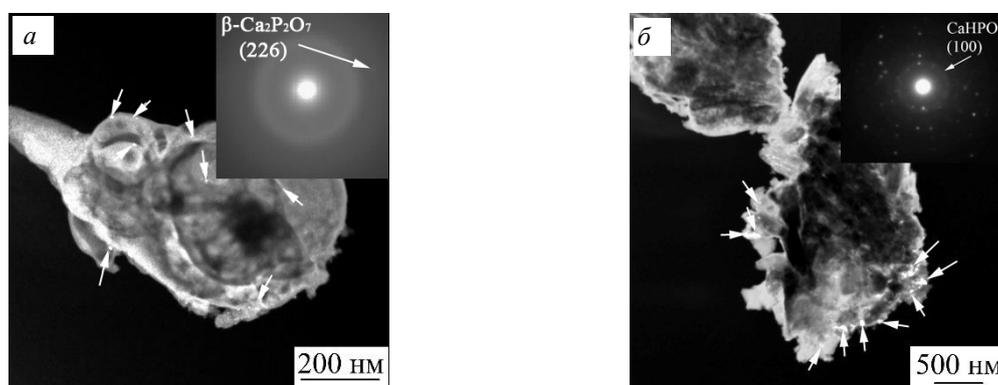


Рис. 2. Темнопольные ПЭМ изображения и МД картины La-Si-КФ покрытий, нанесенных при напряжениях МДО 200 В (а) и 300 В (б)

Таким образом установлено что при импульсных напряжениях 200-250 В формируются рентгеноаморфные La-Si-КФ покрытия. Повышение напряжения МДО от 300 до 350 В приводит к формированию аморфно-нанокристаллической структуры в покрытиях с долей кристаллической фазы до 57 об.% и содержанием нанокристаллических фаз CaHPO_4 , β - $\text{Ca}_2\text{P}_2\text{O}_7$ и TiO_2 (анатаз) размером 5–80 нм.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы фундаментальных научных исследований СО РАН на 2017-2020 гг., проект III 23.2.5.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Комарова Е.Г. Закономерности формирования структуры и свойств микродуговых покрытий на основе замещенных гидроксиапатитов на сплавах титана и ниобия: дис. ... канд. тех. наук/ Е.Г. Комарова. – Томск, 2017. – 190 с.
2. Guo D.G., Wang A.H., Han Y., Xu K.W. Characterization, physicochemical properties and biocompatibility of La-incorporated apatites // Acta Biomaterialia. – 2009. – V. 5. – P. 3512–3523.
3. Современные методы анализа в материаловедении: [учеб. пособие для вузов по специальности «Материаловедение и технология новых материалов»] / С. Н. Кульков, С. П. Бужкова. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2011. – 84 с.

**СРАВНИТЕЛЬНОЕ ИЗУЧЕНИЕ СТОЙКОСТИ ЗАЩИТНЫХ НАНОКОМПОЗИТНЫХ
ПОКРЫТИЙ Al-Si-N И In-Sn-O К УДАРНЫМ ВОЗДЕЙСТВИЯМ ТВЕРДЫХ МИКРОЧАСТИЦ**Р.А. Калиева¹Научный руководитель: доцент, к.ф.-м.н. И.А. Божко^{1,2}¹Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН

Россия, г. Томск, пр. Академический, 2/4, 634055

E-mail: keshrim95@gmail.com**COMPARATIVE STUDY OF THE RESISTANCE OF THE PROTECTIVE NANOCOMPOSITE
Al-Si-N AND In-Sn-O COATINGS TO THE SHOCK IMPACT OF SOLID MICROPARTICLES**R.A. Kaliyeva¹Scientific Supervisor: Ph.D., associate professor I.A. Bozhko^{1,2}¹Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050²Institute of Strength Physics and Materials Science, SB RAS, Russia, Tomsk, av. Academicheskii, 2/4, 634055E-mail: keshrim95@gmail.com

***Abstract.** The results of investigations of the structural and phase state, mechanical, optical and protective properties of Al-Si-N and In-Sn-O systems coatings deposited by magnetron sputtering on K-208 glass are presented.*

Введение. Активное освоение космоса и необходимость разработки космических аппаратов (КА), способных работать в экстремальных условиях космического пространства, требует разработки новых функциональных материалов и технологий их получения. К числу важнейших факторов, способных вызывать эрозию поверхности и местные разрушения, относятся столкновения КА с микрометеороидами. Наиболее от ударов микрометеороидов страдают различные оптические элементы КА. Одним из способов решения данной проблемы может стать нанесение на оптические детали КА защитных оптически прозрачных покрытий, таких как Al-Si-N или In-Sn-O. Целью данной работы являлось исследование структурно-фазового состояния, механических и оптических свойств покрытий Al-Si-N и In-Sn-O, а также оценка их стойкости к ударному воздействию высокоскоростных твердых микрочастиц железа.

Экспериментальная часть. Магнетронное нанесение покрытий осуществлялось на установке УВН-05МД «КВАНТ». Питание магнетрона осуществлялось от импульсного биполярного источника питания частотой 50 кГц. При осаждении покрытий системы Al-Si-N мощность магнетрона составляла 1,2 кВт, в случае осаждения покрытий системы In-Sn-O – 0,4 кВт. В качестве материала подложки использовалось стекло марки К-208.

Исследование структурно-фазового состояния образцов было выполнено методом рентгеноструктурного анализа (РСА) на дифрактометре ДРОН-7 в Co-K α излучении и методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) на микроскопе JEM-2100F при ускоряющем

напряжении 200 кВ. Спектры светопропускания покрытий получены с помощью спектрофотометра СФ-256 УВИ в спектральном диапазоне 200-800 нм. Механические свойства покрытий определяли методом динамического наноиндентирования с помощью прибора ТТХ-ТНТ Nano Hardness Tester при нагрузке на индентор 20 мН. Оценка стойкости к ударным нагрузкам производилась с помощью легкогазовой пушки МПХ23/8 [1]. В качестве бомбардирующих частиц использовали микрочастицы железа сферической формы, средний диаметр которых составил $56 \pm 8,2$ мкм, скорость которых лежала в интервале от 5 до 8 км/с. После проведения ударных испытаний изображения кратеров, формирующихся на поверхности исследуемых образцов, регистрировались с помощью сканирующего электронного микроскопа LEOEVO-50XVP. В качестве количественной характеристики воздействия потока микрочастиц на защитные покрытия использовали относительную поверхностную плотность кратеров $\rho_{отн}$:

$$\rho_{отн} = \frac{\rho_0}{\rho}, \quad (1)$$

где ρ_0 и ρ – поверхностная плотность кратеров на образцах исходного стекла и на образцах стекла с защитным покрытием, соответственно.

Результаты. Результаты исследования фазового состава полученных образцов методами рентгеноструктурного анализа и просвечивающей электронной микроскопии показали, что в покрытии Al-Si-N наблюдается формирование фаз AlN, α - и β -модификаций Si_3N_4 , имеющих гексагональную плотноупакованную структуру, а в покрытии In-Sn-O обнаружено формирование фазы In_2O_3 кубической сингонии. Результаты ПЭМ исследований микроструктуры исследуемых покрытий показали, что кристаллиты формируемого нитрида алюминия в покрытии Al-Si-N имеют вытянутую волокнистую форму, что наблюдалось нами ранее при осаждении покрытий Al-Si-N на подложку кварцевого стекла марки КВ [2]. Покрытия системы In-Sn-O имеют явно выраженную столбчатую структуру (рис. 1). Также по данным ПЭМ было установлено, что сформированные покрытия имеют высокодисперсную структуру: средний размер кристаллитов фаз, формируемых в покрытии Al-Si-N, составляет порядка 10 нм, средний поперечный размер кристаллитов In_2O_3 , формируемого в покрытии In-Sn-O – 35 нм.

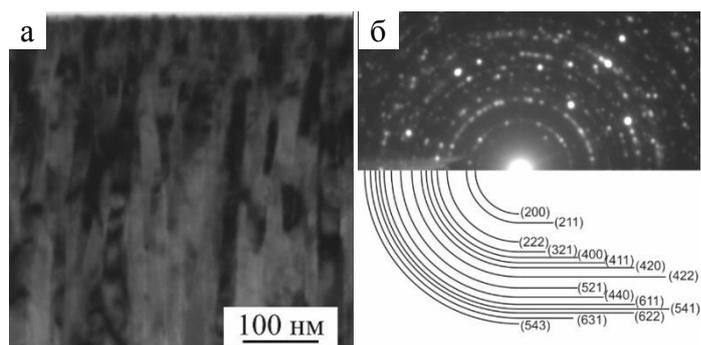


Рис. 1. ПЭМ изображения поперечного сечения покрытия In-Sn-O: а – светлопольное изображение; б – микродифракционная картина

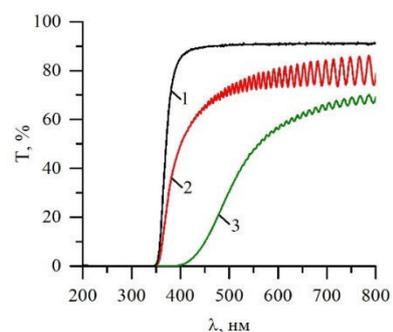


Рис. 2. Спектры пропускания образцов стекла с защитными покрытиями: 1 – стекло К-208; 2 – Al-Si-N; 3 – In-Sn-O

Анализ спектров пропускания света для исследуемых образцов (рис. 2) показал, что исходное стекло К-208 (рис. 2, кривая 1) имеет высокую степень пропускания около 90 % в видимом диапазоне длин волн, а для волн длиной 200-350 нм является непрозрачным. Нанесение защитного покрытия Al-Si-N приводит к незначительному уменьшению светопропускания образца (до 75-80 %) в видимой области

спектра (рис. 2, кривая 2), в то время как светопропускание покрытия In-Sn-O в указанном диапазоне спектра не превышает 70 % (рис. 2, кривая 3). Анализ осцилляций на спектрах пропускания, обусловленных явлением интерференции света в покрытиях, позволил оценить показатель преломления [3] исследуемых покрытий (табл. 1). Следует отметить, что образец с покрытием In-Sn-O имеет широкую полосу поглощения в области длин волн 200-400 нм (рис. 2, кривая 3). В случае образца с покрытием Al-Si-N наблюдаемая полоса поглощения в области длин волн 200-350 нм (рис. 2, кривая 2) обусловлена поглощением подложки из стекла марки К-208 в указанной области спектра (рис. 2, кривая 1). Результаты исследования механических свойств покрытий Al-Si-N и In-Sn-O, сформированных в процессе магнетронного осаждения, представлены в табл. 1.

Таблица 1

Оптические и механические свойства покрытий

Образец	Толщина покрытия, мкм	Показатель преломления	H (ГПа) (F=20,00мН)	E* (ГПа) (F=20,00мН)	W _e
Стекло К-208	-	-	8,4 ± 0,15	92,5 ± 0,82	0,53
Al-Si-N	6,32	2,42	31,1 ± 3,12	278,2 ± 16,73	0,69
In-Sn-O	5,31	3,73	5,72 ± 0,34	154,1 ± 13,79	0,13

Результаты сканирующей электронной микроскопии показали, что на поверхности экспериментальных образцов стекла К-208 до и после нанесения защитных покрытий, подвергнутых бомбардировке потоком высокоскоростных микрочастиц железа, наблюдается формирование кратеров различного диаметра. Анализ СЭМ изображений показал, что на поверхности исходного стекла К-208 большинство сформированных кратеров имеют размер от 10 до 50 мкм. После нанесения защитных покрытий системы Al-Si-N толщиной 6 мкм на образцы стекол К-208 приводит к уменьшению поверхностной плотности кратеров в 2,8 раза по сравнению с исходными стеклами. Это происходит за счет того, что защитные покрытия системы Al-Si-N предотвращают образование на поверхности исследуемых образцов кратеров с размерами менее 30 мкм, а доля кратеров с размером от 30 до 50 мкм составляет менее 1 %. В случае нанесения на образцы стекол К-208 защитных покрытий In-Sn-O толщиной 6 мкм поверхностная плотность кратеров также снижается, но уже в 3,4 раза. Причем в наибольшей степени уменьшается количество кратеров размером от 50 до 100 мкм.

Работа выполнена в рамках основной научной программы исследований академии наук за 2013-2020 гг. и при поддержке программы развития НИ ТПУ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Герасимов А.В., Пашков С.В., Христенко Ю.Ф. Защита космических аппаратов от техногенных и естественных осколков. Эксперимент и численное моделирование // Вестник ТГУ. Математика и механика. – 2011. – Т. 4. – № 16. – С. 70–78.
2. Bozhko I.A., Rybalko E.V., Pershukova A.G., Fedorischeva M.V., Khristenko Yu.F., Sergeev V.P. Microstructure and Properties of Nanocomposite Al-Si-N System Coatings Produced by Magnetron Sputtering // AIP Conference Proceedings – 2016. – V. 1772. – P. 030014.
3. Комраков Б.М., Шапочкин Б.А. Измерение параметров оптических покрытий. – М.: Машиностроение, 1986. – 136 с.

**РЕГИСТРАЦИЯ РЕАКЦИИ НЕКОГЕРЕНТНОГО ФОТОРОЖДЕНИЯ НЕЙТАЛЬНЫХ ПИОНОВ
НА ДЕЙТРОНАХ**

Е.С. Карпенко, М.Я. Кузин, В.В. Гаузштейн

Научный руководитель: к.ф.-м.н. В.В. Гаузштейн

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: eskarpenko@tpu.ru

**REGISTRATION OF THE INCOHERENT PHOTOPRODUCTION NEUTRAL PIONS ON
DEUTERONS**

E.S. Karpenko, M.Ya. Kuzin, V.V. Gauzshtein

Scientific Supervisor: V.V. Gauzshtein

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: eskarpenko@tpu.ru

***Abstract.** The results of the isolation of the events of the reaction of incoherent photoproduction of neutral pions on deuterons are presented. The energies of protons (15-200) MeV, neutron energy (13-210) MeV. Polar angles of emission of protons and neutrons in the range (50-90) degrees.*

Введение. На ускорительно-накопительном комплексе ВЭПП-3 в ИЯФ СО РАН им. Будкера уже более 30 лет ведутся эксперименты по измерению поляризационных наблюдаемых в реакциях когерентного и некогерентного фоторождения пионов на дейтронах. В работе [1] получены первые результаты измерения T_{20} -компоненты тензорной анализирующей способности когерентного фоторождения нейтральных пионов на дейтронах, а в работе [2] выполнены измерения T_{20} , T_{21} и T_{22} -компонент тензорной анализирующей способности некогерентного фоторождения отрицательно-заряженных пионов на дейтронах.

В этом докладе представлены результаты регистрации реакции $\gamma d \rightarrow pn\pi^0$.

Постановка эксперимента. Экспериментальная статистика реакции $\gamma d \rightarrow pn\pi^0$ была выделена из эксперимента для регистрации фоторасщепления дейтрона [3], где нейтроны регистрируются верхним плечом, а протоны нижним. Общая схема эксперимента приведена на рис. 1.

Нижнее плечо регистрации состоит из системы дрейфовых камер, предназначенных для измерения углов вылета протонов, и трёх следующих друг за другом сцинтилляторов.

Верхнее плечо регистрации состоит из двух сцинтилляционных детекторов. Первый сцинтилляционный счетчик расположен на расстоянии примерно 1.5 метра от мишени и имеет толщину 1 см. Его функция - идентификация заряженных частиц. Второй сцинтилляционный детектор состоит из набора толстых сцинтилляторов, находящихся на расстоянии примерно 3 метра от мишени. Этот сцинтилляционный детектор предназначен для измерения энергии по времени пролета и углов вылета протонов и нейтронов.

Обработка экспериментальных данных. Идентификация протонов в нижнем плече осуществлялась путём анализа амплитуд сигналов ФЭУ с двух следующих друг за другом слоев

сцинтилляторов. Фоновыми частицами в этом плече являются дейтроны, электроны и заряженные пи-мезоны (рис. 2).

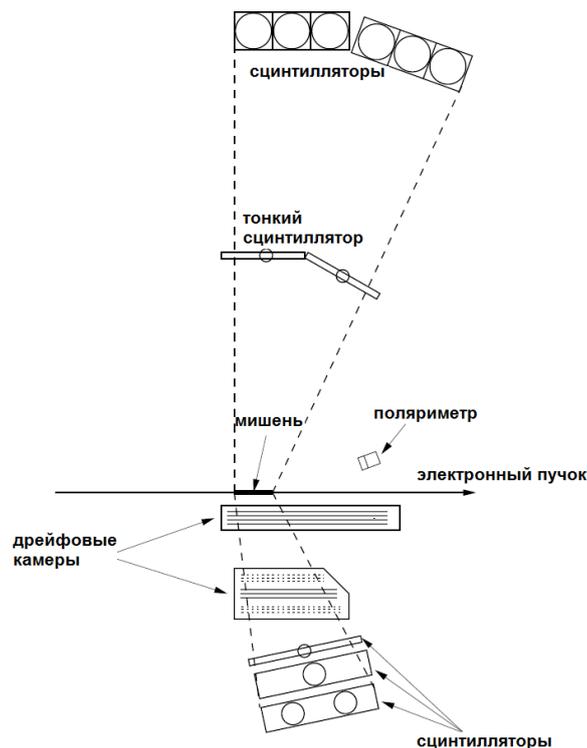


Рис. 1. Схема расположения детектирующей аппаратуры

Идентификация нейтронов в верхнем плече осуществляется время-пролетной методикой. На рисунке 3 слева показаны двумерные распределения по времени пролета и амплитуде сигнала с сцинтиллятора при наличии порогового сигнала в тонком сцинтилляционном счетчике (сверху) и отсутствии (снизу).

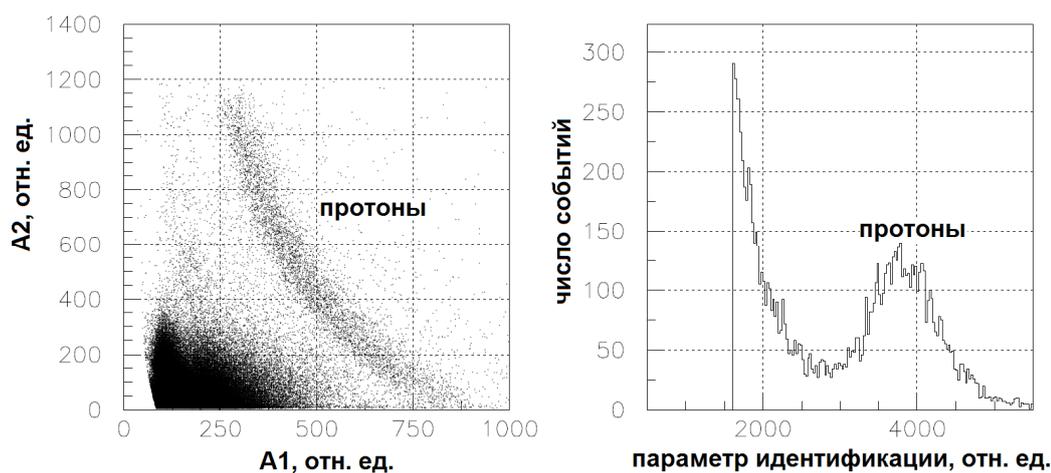


Рис. 2. Идентификация протонов в нижнем плече

На гистограммах справа показаны распределения по критерию идентификации протонов и нейтронов. Для выделения событий реакции $\gamma d \rightarrow p\pi^0$, необходимо ввести дополнительный критерий, отделяющий события исследуемой реакции от фоторасщепления дейтрона $\gamma d \rightarrow pn$. Этим критерием

является недостающая эффективная масса M_x и расположение в одной плоскости протона и нейтрона в конечном состоянии.

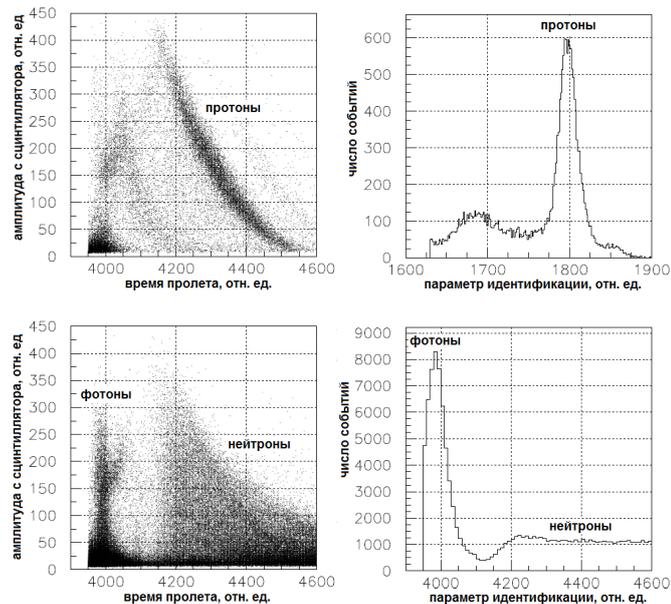


Рис. 3. Идентификация протонов и нейтронов в верхнем плече

На рисунке 4 показаны распределения по эффективной недостающей массе для всех (pn)-совпадений и для компланарных (pn)-совпадений, которые соответствуют фоторасщеплению дейтрона.

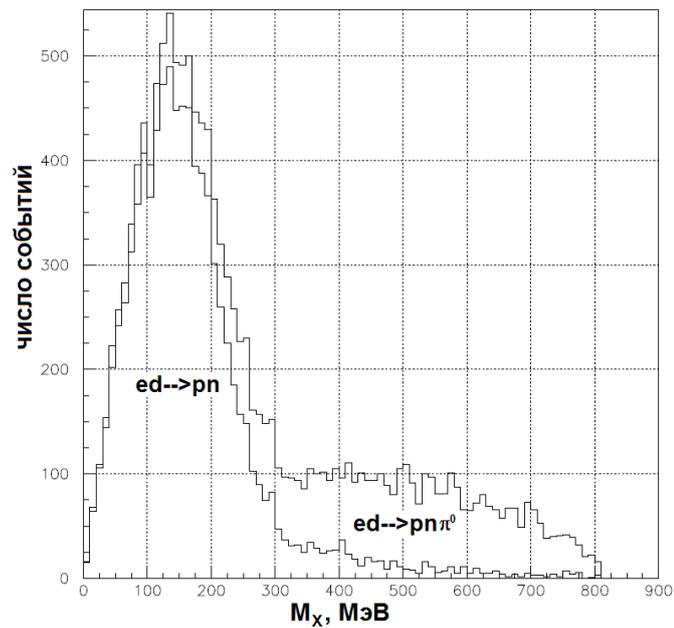


Рис. 4. Распределение по недостающей эффективной массе для (pn)-совпадений.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-32-00013.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зеваков С.А., Гаузштейн В.В., Головин Р.А. и др. // Известия Российской академии наук. Серия физическая. - 2014 - Т. 78 - №. 7. - С. 826-83.
2. Гаузштейн В.В., Зеваков С.А., Логинов А.Ю. и др. // Ядерная Физика. – 2015. – Т. 78. – № 1-2. – С. 3
3. Rachek I.A., Barkov L.M., Belostotsky S.L. et al. // Phys. Rev. Let. – 2007. – V. 98. – N. 17. – 182303

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВОДОРОДОСТОЙКОСТИ, МЕХАНИЧЕСКИХ И ТРИБОЛОГИЧЕСКИХ
СВОЙСТВ ЦИРКОНИЕВОГО СПЛАВА Э110 С ПОКРЫТИЕМ НИТРИДА ТИТАНА,
ОСАЖДЕННОГО МЕТОДОМ МАГНЕТРОННОГО РАСПЫЛЕНИЯ**

Э.М. Керимкулов

Научный руководитель: ассистент, Е.Б. Кашкаров

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: Theericfrost@mail.ru

**HYDROGEN RESISTANCE, MECHANICAL AND TRIBOLOGICAL PROPERTIES OF ZIRCONIUM
ALLOY E110 WITH TITANIUM NITRIDE COATING DEPOSITED BY MAGNETRON
SPUTTERING**

E.M. Kerimkulov

Scientific Supervisor: assistant, E .B. Kashkarov

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: Theericfrost@mail.ru

***Abstract.** In this paper, the increase in hydrogen resistance, mechanical and tribological properties of E110 alloy samples by TiN protective coating deposition under high-temperature gas-phase hydrogenation at 350 ° C, 450 ° C and 900 ° C was shown. The crystalline structure, surface morphology and depth distribution of elements were analyzed by X-ray diffraction, optical microscopy and glow-discharge optical emission spectroscopy, respectively. The intensity of hydrogen absorption by TiN-coated E110 alloy increases with hydrogenation temperature. Hardness and Young's modulus of the TiN coatings slightly changed under hydrogenation up to 450 ° C and dropped at 900 ° C. No cracks or delaminations were observed on the surface of TiN-coated samples after hydrogenation up to 450 ° C, however, the film was cracked after hydrogenation at 900 ° C. Evolution of friction coefficient of hydrogenated samples was shown.*

Введение. В настоящее время актуальна проблема защиты циркониевых сплавов (Э110, Э125, Э635 и др.), являющихся конструкционными материалами оболочек тепловыделяющих элементов (ТВЭЛов), от деструктивного воздействия водорода в активных зонах водо-водяных и кипящих реакторов (ВВЭР и РБМК). Поглощенный циркониевыми сплавами водород, при достижении критической концентрации вызывает охрупчивание ТВЭЛа и последующее его разрушения. По техническим условиям не удается исключить проникновение водорода в изделия из циркониевых сплавов. Ввиду этого, разрабатываются различные технологии защиты сплавов от деструктивного воздействия водорода. Так, например, в работах [1, 2] приводятся нитридные и оксидные защитные покрытия. Одним из перспективных с точки зрения защитных свойств являются покрытия нитрида титана TiN. Покрытия TiN, осажденные методом магнетронного распыления, снижают интенсивность поглощения водорода циркониевыми сплавами и обладают высокой коррозионной и эрозионной стойкостью [3]. Таким образом, целью данной работы является исследование водородостойкости,

механических и трибологических свойств циркониевого сплава Э110 при наводороживании в диапазоне температур 350-900 °С.

Материалы и методы исследования. Для проведения экспериментов были подготовлены образцы из сплава Э110 размером 20×20×2 мм. Предварительно образцы были отшлифованы с помощью карбидкремниевой бумаги до средней высоты шероховатостей 60 нм, после чего были промыты в ацетоне. Нанесение покрытий осуществлялось на установке «Радуга-спектр» на кафедре общей физики ТПУ. Остаточное давление в камере составило 3×10^{-3} Па. Перед осаждением покрытия проводилась ионная очистка (Ar) низкоэнергетичным ионным источником при напряжении 1500 В в течение 5 мин. Основные параметры процесса магнетронного распыления: напряжение 380 В, ток 4 А, время напыления 30 мин. Анализ кривых поглощения водорода проводился на автоматизированном комплексе Gas Reaction Controller при температурах 350, 450 и 900 °С. С помощью металлографического микроскопа (МЕТАМ ЛВ-31) были получены изображения поверхностей образцов до и после наводороживания. При помощи высокотемпературного трибометра (PC-Operated High Temperature Tribometer THT-S-AX0000) было проанализировано изменение коэффициента трения. Твердость покрытий была определена по 10 индентациям при нагрузке 10 мН на нанотвердомеде Nanotest 600 (Micro Materials, United Kingdom). Глубина индентации для всех измерений была меньше 1/10 толщины покрытия.

Описание результатов и обсуждение. Из анализа графиков сорбции водорода образцами (рис. 1) было показано, что скорость сорбции водорода циркониевым сплавом с покрытием TiN существенно ниже, чем исходным сплавом.

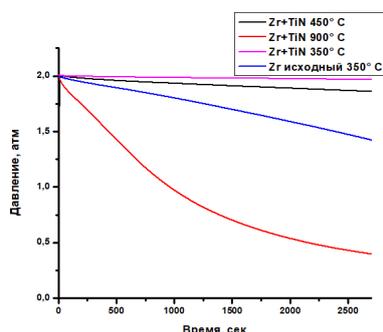


Рис. 1. График сорбции водорода образцами циркониевого сплава с покрытием TiN

С увеличением температуры наводороживания происходит увеличение интенсивность поглощения водорода в образцах циркониевого сплава с покрытием. При этом до температуры 450 °С интенсивность поглощения водорода меняется незначительно и имеет линейный вид. Однако, при температуре 900 °С интенсивность поглощения водорода резко возрастает, что связано с увеличением скорости диффузии водорода через покрытие и образованием трещин в покрытии.

Склонность покрытий TiN к растрескиванию при температуре 900 °С обусловлена различием термических коэффициентов расширения нитрида титана и циркония.

Твердость и модуль Юнга осажденного покрытия составили $28,7 \pm 1,1$ ГПа и 251 ± 9 ГПа, соответственно (рис. 2). После выдержки покрытий в среде водорода при температурах до 450 °С, твердость остается на уровне исходного покрытия, после чего резко снижается до 18 ± 3 ГПа при 900 °С, что может быть связано с увеличением размера зерна покрытия и появлением растягивающих напряжений. Модуль Юнга покрытия TiN постепенно возрастает до 272 ± 12 ГПа при увеличении температуры наводороживания до 450 °С, после чего также снижается до 244 ± 13 ГПа.

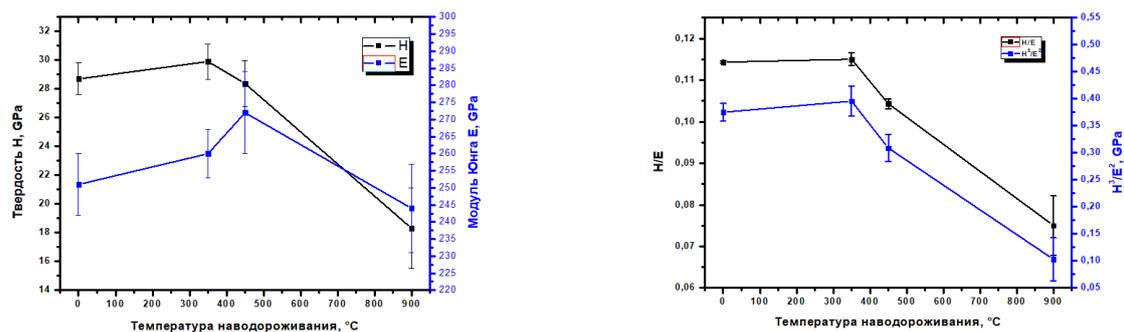


Рис. 2. Графики зависимости твердости и модуля Юнга защитных покрытий TiN от температуры наводороживания 350, 450 и 900 °C (первая точка – значение до наводороживания)

Коэффициент трения осажденного покрытия TiN составил 0,22, что в два раза меньше, чем коэффициент трения циркониевого сплава Э110. Стоит отметить, что низкий коэффициент трения покрытия может оказывать благоприятный эффект на трибологические свойства сплава при вибрациях оболочек ТВЭЛов о дистанцирующие решетки. Износостойкость покрытий возрастает с увеличением температуры наводороживания, что может быть связано с формированием переходной диффузионной области между покрытием и циркониевым сплавом.

Выводы. Было показано, что формирование покрытий TiN на поверхности циркониевого сплава Э110 приводит к снижению наводороживания сплава. Скорость поглощения водорода сплавом с покрытием возрастает с увеличением температуры наводороживания. Твердость покрытий с увеличением температуры наводороживания до 450 °C не изменяется и составляет примерно 28 ГПа, при этом модуль Юнга покрытий возрастает от 250 до 270 ГПа. Увеличение температуры наводороживания до 900 °C приводит к падению твердости и модуля Юнга покрытия, что может быть связано с увеличением размера зерна в покрытии и появлением растягивающих напряжений вследствие различия термических коэффициентов расширения циркониевого сплава и покрытия. Показано, что при высоких температурах (900 °C) осажденные методом магнетронного распыления покрытия TiN склонны к растрескиванию. Таким образом, для защиты циркониевого сплава при высоких (аварийных) температурах необходимо формирование промежуточного слоя для выравнивания коэффициента термического расширения, либо формирование более эластичных покрытий, в том числе покрытий TiN.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Белоус В.А., Вьюгов П.Н., и др. Механические характеристики твэльных трубок из сплава Zr1Nb после осаждения ионно-плазменных покрытий // ВАНТ. 2013. №2. С. 140-143
2. Hiroki Hasuyama, Yukari Shima et al. Adhesive and corrosion-resistant zirconium oxide coatings on stainless steel prepared by ion beam assisted deposition // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. – 1997. – Vol. 127-128. – P. 827-831.
3. Мубояджян С.А., Луценко А.Н. и др. Исследование свойств нанослойных эрозионно-стойких покрытий на основе карбидов и нитридов металлов // ВИАМ. – 2011.

**СТАБИЛЬНОСТЬ ХАРАКТЕРИСТИК СЕНСОРОВ ВОДОРОДА НА ОСНОВЕ ТОНКИХ
ПЛЕНОК Pt/Pd/SnO₂:Sb,Y**

С.В. Ким

Научный руководитель: к.ф.-м.н. А.В. Алмаев

Национальный исследовательский Томский государственный университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина 36, 634050

E-mail: thestimas@mail.ru

STABILITY OF CHARACTERISTICS OF HYDROGEN SENSORS BASED ON THIN FILMS

Pt/Pd/SnO₂:Sb, Y

S.V. Kim

Scientific Supervisor: PhD. A.V. Almaev

Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenina ave., 36, 634050

E-mail: thestimas@mail.ru

***Abstract.** This report presents the results of studies of the characteristics of hydrogen sensors based on thin Pt / Pd / SnO₂: Sb, Y films. Measurements were made of the concentration dependence of the response and drift of the characteristics of these same sensors.*

Введение. Необходимость разработки сенсоров низких концентраций газов отличающихся высокой чувствительностью и быстродействием стимулирует интерес к исследованиям новых сенсоров на основе тонких плёнок металлооксидных полупроводников. Газовая чувствительность таких приборов основана на явлении обратимой хемосорбции газов на поверхности полупроводника. Но при долгом времени эксплуатации чувствительность, и быстродействие газовых сенсоров снижается за счет дрейфа характеристик. Это является большой проблемой при постоянном длительном мониторинге помещения на наличие водорода. В настоящей работе на примере тонких пленок диоксида олова исследована зависимость дрейфа отклика газовых сенсоров водорода от времени эксплуатации.

Материалы и методы исследования. Для повышения эффективности работы сенсоров, плёнки SnO₂ модифицируют добавками металлов на поверхности и в объеме. В качестве объекта исследований были выбраны сенсоры на основе тонких пленок Pt/Pd/SnO₂:Sb,Y. Сурьма является мелкой донорной примесью и позволяет снизить рабочее сопротивление плёнок до 0,1-10 МОм. Добавки благородных металлов на поверхности SnO₂ играют роль катализаторов реакций, имеющих места при хемосорбции газов [1]. Легирование пленок диоксида олова иттрием снижает температуру максимальной газовой чувствительности более чем в два раза, улучшает селективность к различным газам и уменьшает дрейф характеристик пленок [1]. Последнее явление обусловлено способностью иттрия образовывать крепкие связи с решеточным кислородом, тем самым противодействуя образованию вакансий кислорода и их миграции в объеме пленок.

Пленки SnO₂ были получены методом магнетронного распыления мишени, состоящей из сплава олова и сурьмы. Слои катализаторов на поверхности плёнок формировали тем же методом магнетронного напыления. Для введения добавок в объем плёнок на поверхности мишени размещали

кусочки соответствующего металла. При этом отношение S_M/S_{Sn} , где S_M – площадь кусочков металла, S_{Sn} – площадь распыляемой части мишени, позволяющее направленно влиять на свойства сенсоров составляло $S_Y/S_{Sn}=3 \cdot 10^{-3}$. Готовые образцы подвергали отжигу при температуре $T_{отж}=723 K$.

Результаты. Температуру сенсоров на основе тонких пленок Pt/Pd/SnO₂:Sb,Y при работе в режиме постоянного нагрева в атмосфере чистого воздуха меняли, начиная от 323 K до 723 K с шагом 25 K. Полученную экспериментальную зависимость можно разбить на несколько участков. При повышении температуры нагрева сенсора от 323 K до 498 K его сопротивление уменьшается предположительно за счет ионизации примесных уровней доноров. При этом в области низких температур на зависимости $\ln R_0$ от $10^3/T$ имеются два линейных участка которые можно аппроксимировать кривыми Аррениуса (рис. 1). С помощью такой обработки были вычислены энергии активации примесей, значения которых приведены в таблице 1. Наличие двух линейных участков свидетельствует о присутствии двух или более примесных уровней в запрещенной зоне диоксида олова. На рисунке 1 минимум на зависимости $\ln R_0$ от $10^3/T$ соответствует температуре 498 K.

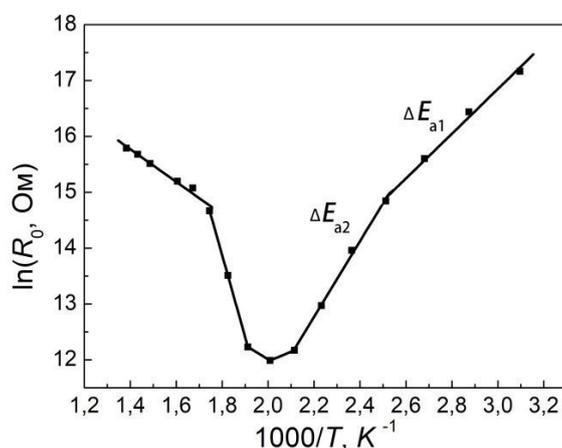


Рис. 1. График зависимости $\ln R_0$ от $1000/T$

При дальнейшем увеличении температуры нагрева сенсоров от 498 K до 723 K наблюдается рост R_0 . Эксперимент не проводился при более высоких температурах т.к. $T=723 K$ соответствует температуре отжига. Таким образом, работа сенсора при $T > T_{отж}$ вызывает дрейф характеристик сенсоров и может способствовать выходу прибора из строя. Согласно обзору литературы рост сопротивления на рассматриваемом участке обусловлен переходом хемосорбированного кислорода из молекулярной формы в атомарную с последующим увеличением его плотности.

Из анализа температурной зависимости R_0 следует, что добавка иттрия в объеме тонких пленок Pt/Pd/SnO₂:Sb приводит к слабому увеличению сопротивления сенсоров. Наблюдаемый разброс R_0 и ΔE вызвано несовершенством технологии или неоднородностью содержания добавок в сенсорах.

Таблица 1

Характеристики сенсоров на основе Pt/Pd/SnO₂:Sb,Y в атмосфере чистого воздуха

N сенсора	R_0 (при 323K), МОм	ΔE_{a1} , эВ	ΔE_{a2} , эВ
1	28,5	0,34±0,02	0,59±0,02
2	5,8	0,30±0,02	0,55±0,03
3	2,8	0,20±0,02	0,45±0,03

Для исследования дрейфа характеристик использовались другие 4 сенсора из этой же партии. Это сделано для того чтобы устранить влияние дополнительных факторов, таких как, перегрев сенсоров при высоких температурах и воздействии больших концентраций водорода. В качестве рабочей температуры сенсоров при исследовании их дрейфа была выбрана $T=673\text{ K}$. Измерения проводились с промежутком 1-2 недели при подаче 50, 100, 300 и 1000 ppm водорода в измерительную камеру. В период между измерениями сенсоры находились преимущественно в герметизированной измерительной камере без нагрева. Рисунок 2 демонстрирует зависимость отклика сенсоров на водород от времени эксплуатации. Для интерполяции G_H/G_0 при $n_{H_2}=50, 100, 300\text{ ppm}$ использовались средние значения этих величин. При $n_{H_2}=1000\text{ ppm}$ G_H и отклик растут в течение всего времени эксплуатации.

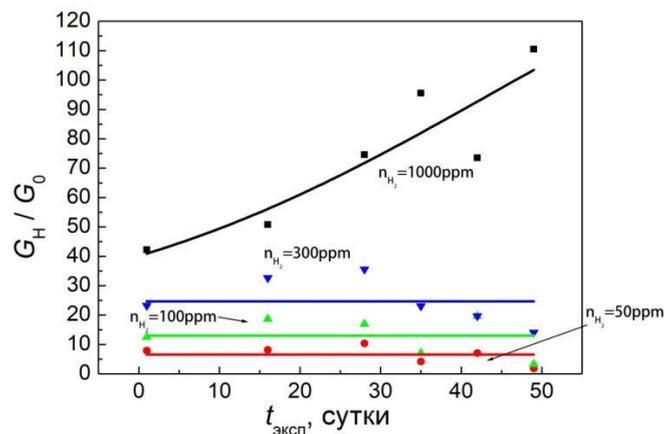


Рис. 2. Дрейф отклика при разных концентрациях водорода

Заключение. Введение добавки иттрия способствует снижению дрейфа характеристик сенсоров: G_0 , G_H при $n_{H_2} \leq 300\text{ ppm}$ и G_H/G_0 при $n_{H_2} \leq 300\text{ ppm}$. Согласно литературе, данное явление обусловлено способностью иттрия образовывать крепкие связи с решетчатым кислородом, тем самым противодействуя образованию вакансий кислорода и их миграции в объеме пленок. Стоит отметить, что также как для сенсоров Pt/Pd/SnO₂:Sb при $n_{H_2} = 1000\text{ ppm}$ стабилизация характеристик не наблюдается.

Список литературы

1. Максимова Н.К., Севастьянов Е.Ю., Сергейченко Н.В., и др. Полупроводниковые тонкопленочные газовые сенсоры. – Томск: Изд-во НТЛ, 2016. – 164 с.

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ И ТЕРМОКИНЕТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ЛЕСНОЙ
ПОДСТИЛКИ В ПОЖАРООПАСНЫХ РАЙОНАХ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

С.С. Кралинова, Н.Е. Шлегель

Научный руководитель: к.ф.-м.н. А.О. Жданова

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: SkralinovaS@yandex.ru

**DETERMINATION OF THERMOPHYSICAL AND THERMO-KINETIC PROPERTIES OF FOREST
COMBUSTIBLE MATERIALS IN FIRE-FIGHTING AREAS OF THE RUSSIAN FEDERATION**

S.S. Kralinova, N.E. Shlegel

Scientific Supervisor: Phd. A.O. Zhdanova

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: SkralinovaS@yandex.ru

***Abstract.** Experimental studies to determine the thermophysical and thermokinetic properties (thermal conductivity, specific heat) of forest combustible materials were made. Typical materials of the softwood and deciduous forests of fire-dangerous regions of the Russian Federation were used as samples. The received results will be able to form a basis for establishment of features and regularities of influence of coefficient of thermal conductivity, specific heat of on process of the suppression of forest combustible materials thermal decomposition reaction at local ignition of a forest zone.*

Введение. Лесные пожары наносят вред глобального характера на экологические, экономические и социальные сферы деятельности жизни многих стран мира [1, 2]. Выявлено, что важной составляющей при распространении стихийных пожаров являются не только физические аспекты процесса горения, но и химия стадий деструкции ЛГМ, а также кинетика пиролиза горючего материала [3, 4]. При этом опубликовано недостаточно данных по влиянию теплофизических свойств ЛГМ на процесс прекращения его термического разложения. Цель настоящей работы – экспериментальное исследование влияния теплофизических и термокинетических параметров лесных горючих материалов на условия и характеристики процесса подавления реакции его термического разложения.

Материалы и методы исследований. В качестве ЛГМ был рассмотрен неживой компонент наиболее пожароопасных регионов России – Дальневосточного, Центрального и Сибирского Федеральных округов.

Для измельчения ЛГМ использовали быстроходную роторную мельницу Pulverisette (размер частиц составил около 200 мкм). Сделанные таким образом порошки исследуемых материалов при помощи гидравлического пресса спрессовывались в образцы цилиндрической формы. Для измерения теплофизических характеристик ЛГМ (коэффициент теплопроводности, удельная теплоемкость, Дж/(кг·К), коэффициент температуропроводности, см²/с) использовалась система DLF-1200 TA Instruments [5], принцип действия которой основан на оценке скорости распространения импульса тепла в толще образца.

Для проведения измерений обязательно наличие калибровочного образца, загружаемого в модуль термостата одновременно с тестируемыми образцами. В качестве калибровочного образца использовался материал с известными теплофизическими характеристиками – Рутех7740. Перед помещением в термостат для образцов ЛГМ определяются масса, высота, диаметр основания и плотность. Эти данные заносятся в программное обеспечение системы DLA-1200 TA Instruments.

Термический анализ ЛГМ проводился на синхронном термоанализаторе STA 449F3 NETZSCH в следующих условиях: образец помещался в корундовый тигель, масса образца составляла 25 мг, нагрев от 300 К до 1270 К со скоростью 10 К/мин в среде аргона с расходом газа 100 мл/мин.

Результаты. На рисунке 1 и 2 соответственно представлены полученные в результате экспериментальных исследований значения теплофизических характеристик для образцов Сибирского федерального округа (Томской области) и Дальневосточного федерального округа (город Владивосток) в диапазоне температур от 25 до 150 °С.

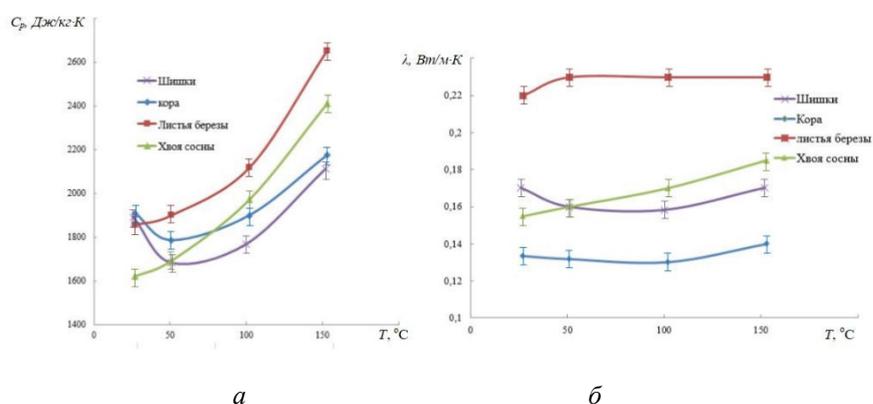


Рис. 1. Зависимость коэффициента удельной теплоемкости (а), теплопроводности (б), образцов хвои сосны, листьев березы, шишек хвойных пород деревьев и коры от температуры

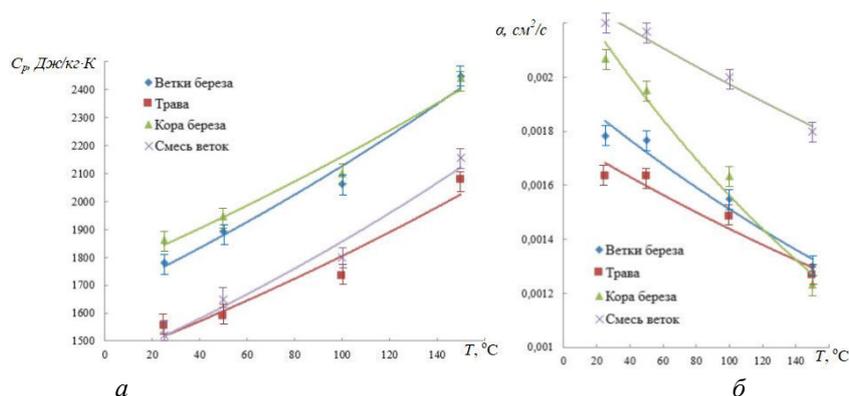


Рис. 2. Зависимость коэффициента удельной теплоемкости (а), температуропроводности (б), коры березы, травы, веток лиственных пород деревьев от температуры

Заметен (рис. 1 – рис.2) существенный рост удельной теплоемкости рассмотренных ЛГМ с ростом температуры. Анализ опубликованной литературы позволил установить удовлетворительную корреляцию полученных значений теплофизических характеристик.

Полученные термокинетические параметры разложения органической массы ЛГМ и образования летучих веществ для всех изученных материалов представлены в таблице 1.

Таблица 1

Термокинетические характеристики ЛГМ

Регион	Тип ЛГМ	E , кДж/моль	k , 1/с	E , кДж/моль	k , 1/с	E , кДж/моль	k , 1/с
		Участок 1		Участок 2		Участок 3	
Сибирский ФО	Листья березы	102,36	$2,93 \cdot 10^9$	74,61	$8,55 \cdot 10^5$	49,46	$8,52 \cdot 10^2$
	Хвоя сосны	71,57	$1,81 \cdot 10^6$	80,91	$2,06 \cdot 10^6$	30,62	$2,96 \cdot 10^1$
	Солома	70,63	$8,33 \cdot 10^5$	19,92	$3,08 \cdot 10^0$	-	-
	Ветки	97,24	$3,13 \cdot 10^8$	151,2	$2,04 \cdot 10^{12}$	21,39	$5,44 \cdot 10^0$
	Кора	88,66	$8,86 \cdot 10^7$	115,67	$3,32 \cdot 10^9$	26,73	$1,04 \cdot 10^1$
	Шишки	73,25	$1,20 \cdot 10^6$	136,12	$1,39 \cdot 10^{11}$	29,96	$2,37 \cdot 10^1$
Дальневосточный ФО	Ветки березы	77,27	$4,83 \cdot 10^6$	93,49	$2,95 \cdot 10^7$	13,46	$1,21 \cdot 10^0$
	Кора березы	139,58	$1,86 \cdot 10^{13}$	93,50	$7,27 \cdot 10^7$	14,16	$1,09 \cdot 10^0$
	Смесь веток (60% ветки ели, 40% ветки березы)	70,34	$1,46 \cdot 10^6$	97,82	$9,86 \cdot 10^7$	20,57	$4,28 \cdot 10^0$
	Трава	-	-	61,54	$9,78 \cdot 10^4$	28,45	$1,73 \cdot 10^1$

Заключение. Проведенные экспериментальные исследования позволяют установить эффективные значения теплофизических и термокинетических свойств неживого компонента, что поспособствует развитию существующих и созданию новых прогностических моделей разложения и подавления реакции пиролиза в слоях лесного массива.

Исследование выполнено за счет гранта Президента РФ (проект МК-1684.2017.8).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Калашникова Т.В. Пожары при добыче нефти и газа // Актуальные проблемы гуманитарных и естественных наук. – 2017. – № 1-1. – С. 66–69.
2. Атлас риска пожаров на территории Российской Федерации – М.: ООО «Издательско-продюсерский центр»
3. Гришин А.М., Зима В.П., Кузнецов В.Т., Скорик А.И. Зажигание лесных горючих материалов потоком лучистой энергии // Физика горения и взрыва. – 2002. – Т. 38, № 1. – С. 30-35.
4. Гришин А.М., Голованов А.Н. О потухании лесных горючих материалов при постоянных и переменных воздействиях потока инертного газа на зону горения // Физика горения и взрыва. – 2001. – Т. 37, № 5. – С. 75-80.
5. Шлегель Н. Е. Измерение теплофизических параметров лесных горючих материалов с помощью системы DLA-1200 ТА / Н. Е. Шлегель ; науч. рук. А. О. Жданова // Интеллектуальные энергосистемы : труды V Международного молодежного форума, 9-13 октября 2017 г., г. Томск : в 3 т. — Томск : Изд-во ТПУ, 2017. — Т. 1. — [С. 82-85]

**INFLUENCE OF PROTON IRRADIATION ON STRUCTURE AND MECHANICAL PROPERTIES
OF NANOSCALE MULTILAYER METALLIC Zr/Nb COATING**

D.G. Krotkevich

Scientific Supervisor: E.B. Kashkarov

National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia, Lenin Avenue 43, 634050

E-mail: dimka.kro@gmail.com

**ВЛИЯНИЕ ОБЛУЧЕНИЯ ПРОТОНАМИ НА СТРУКТУРУ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
НАНОРАЗМЕРНОГО МНОГОСЛОЙНОГО МЕТАЛЛИЧЕСКОГО ПОКРЫТИЯ Zr/Nb**

Д.Г. Кроткевич

Научный руководитель: Е.Б. Кашкаров

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Россия,

г. Томск, пр. Ленина, 43, 634050

E-mail: dimka.kro@gmail.com

***Аннотация.** Образцы наноразмерного многослойного Zr/Nb покрытия, полученные путем магнетронного распыления, были подвергнуты облучению пучком протонов с током 2 мкА и 4 мкА на линейном ускорителе ЭСГ-2,5. Анализ распределения протонов и дефектов по глубине был проведен в программном пакете SRIM. Методом рентгеноструктурного анализа определены размер кристаллитов и микронапряжения после облучения. Оценка изменения дефектной структуры покрытий также была проведена по результатам измерения электросопротивления. Механические характеристики, такие как твердость и модуль Юнга были рассчитаны из данных по наноиндентированию.*

Introduction. Nanoscale multilayer metallic (NMM) coatings represent a perspective class of heterogeneous materials, they are widely studied to determine the correlation between materials properties (interfaces, grain size, etc.) with mechanical properties [1, 2] and radiation damage tolerance [3-5].

One system deserves a special attention: Zr/Nb multilayer coating. The Zr-Nb alloys are widely known as construction material for nuclear industry due to high mechanical properties, radiation damage tolerance, and low capture cross-section for thermal neutrons. Thereby, the use of Zr/Nb multilayer coatings should show improved features of Zr-Nb alloys as a result of their layered structure. Also it should lead to high immiscibility due to incoherent (hcp-Zr, bcc-Nb) type of interface [6].

In this paper, the technique of creating irradiation-induced defects using linear ion accelerator with Van de Graaf generator is described. Also evolution of microstructure and mechanical properties due to irradiation is shown.

Materials and methods. The Zr/ Nb multilayer coating was deposited on single crystal Si substrate via DC magnetron sputtering. The total thickness of the coating was 1350 nm; the thickness of individual layer was 57 nm for Zr and 39 nm for Nb. The penetration depth and distribution of defects were determined with SRIM-2013 simulation code. For irradiation, specimens were covered with Al foil with thickness of 11 μm (in order to reduce the energy of proton beam) before they were mounted in the chamber of linear ion accelerator with Van de Graaf generator. They were exposed to 900 keV proton beams with dose range from 4.5×10^{16} to 1.35×10^{17} protons/cm², the irradiation time ranged from 1 to 3 hours, and ion current was 2 and 4 μA . X-ray diffraction

(XRD) analyses before and after irradiation were performed on Shimadzu XRD-700S diffractometer with Cu K α radiation ($\lambda = 0,154$ nm) to observe changes in microstructure. The hardness and the Young's modulus of the initial and irradiated coatings were evaluated by a nanoindentation method using the Berkovich indenter. Also electrical resistance was measured.

Results and discussion. The depth profile and vacancy distribution per layer of 900 keV proton beam were carried out using SRIM-2013 simulation code. The most probable stopping range is 850-950 nm.

The XRD pattern for irradiated specimens (Fig. 1) revealed-that no additional reflexes were found but variations in the reflex intensities and FWHM were clear.

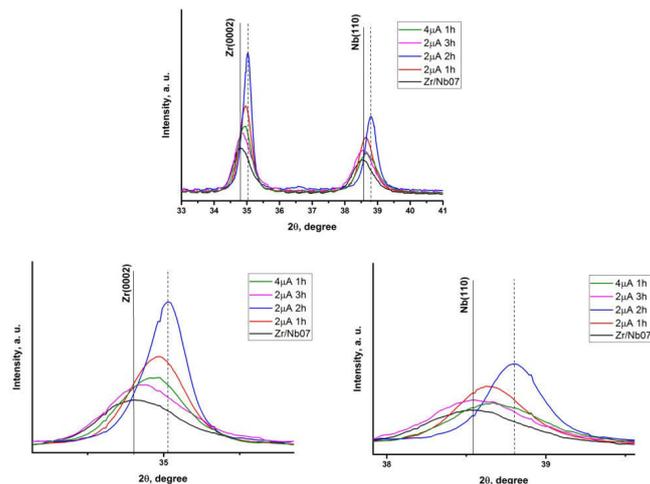


Fig.1. XRD pattern of irradiated samples with detailed information of Zr(0002) plane and Nb(001) plane

As demonstrated in Figure 1, proton beam irradiation resulted in peak shifting toward higher 2Θ angle, it probably means that structure was distorted due to stress caused by irradiation. In all cases intensities were increased during the irradiation.

The values of FWHM along Zr(0002) and Nb(110) planes are given in Table 1. As seen from the table, irradiation with 2 μ A current and time 1 and 2 hours led to considerable decrease in FWHM value along both (Zr and Nb) planes, however, increasing the time to 3 hours or current to 4 μ A caused nearly no changes in FWHM value.

Table 1

Structural parameters of Zr (0002) and Nb (110) planes before and after proton irradiation

Plane	Zr (0002)			Nb (110)		
	FWHM, degrees	Crystalline size, nm	Microstrain	FWHM, degrees	Crystalline size, nm	Microstrain
native	0.69	12.51	0.0029	0.80	10.93	0.00331
2 μ A, 1 h	0.47	18.71	0.00194	0.58	15.13	0.00239
2 μ A, 2 h	0.35	25.04	0.00145	0.45	19.57	0.00185
2 μ A, 3 h	0.67	12.93	0.0028	0.79	11.02	0.00329
4 μ A, 1 h	0.55	15.84	0.00229	0.76	11.53	0.00314

As in case of the intensities of diffraction peak the most considerable change in crystalline size and microstrain were observed for current 2 μ A and time 1 and 2 hours, thus in all cases irradiation led to increase in

crystalline size and decrease of microstrain value. This phenomenon probably occurred due to ion-bombardment-induced grain growth (IBGG) in thin films [7].

Measurements of electric resistance showed the same picture, the most significant changes in values were observed for 2 μ A current and time 1, 2 hours, proving that proton irradiation leads to a kind of ordering of the structure.

Formed nanoscale multilayer coatings showed high mechanical characteristics: hardness 4.9 GPa and Young's modulus of 128.9 GPa. Irradiation with a proton beam caused significant changes in the mechanical properties: hardness and Young's modulus (Fig. 2)

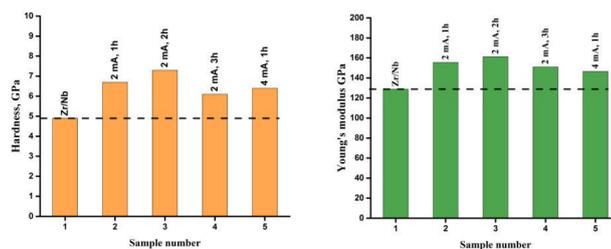


Fig. 2. Hardness and Young's modulus obtained from nanoindentation tests before and after proton irradiation

After irradiation, the hardness and Young's modulus of coatings increased: by 37% and 21% (2 μ A, 1 h), 49% and 25% (2 μ A, 2 h), 24% and 17% (2 μ A, 3 h), 48% and 13% (4 μ A, 1 h), respectively.

Conclusion. Samples of the Zr/Nb NMM coating were irradiated with proton beam on the linear accelerator with Van de Graaf generator. The correlation between XRD results, FWHM narrowing, crystallite size, microstrain, changes in values of electrical resistance and mechanical properties were observed.

REFERENCES

1. Callisti M., Polcar T. Combined size and texture-dependent deformation and strengthening mechanisms in Zr/Nb nano-multilayers //Acta Materialia. – 2017. – Vol. 124. –pp. 247-260.
2. Zbib H. M. et al. Analysis of plastic deformation in nanoscale metallic multilayers with coherent and incoherent interfaces //International Journal of Plasticity. – 2011. – Vol. 27. – №. 10. – pp. 1618-1639.
3. Gao Y. et al. Radiation tolerance of Cu/W multilayered nanocomposites //Journal of Nuclear Materials. – 2011. – Vol. 413. – №. 1. –pp. 11-15.
4. Chen F. et al. Atomic simulations of Fe/Ni multilayer nanocomposites on the radiation damage resistance //Journal of Nuclear Materials. – 2016. – Vol. 468. – pp. 164-170.
5. Misra A. et al. The radiation damage tolerance of ultra-high strength nanolayered composites //JOM Journal of the Minerals, Metals and Materials Society. – 2007. – Vol. 59. – №. 9. –pp. 62-65.
6. Frutos E. et al. Length-scale-dependent mechanical behaviour of Zr/Nb multilayers as a function of individual layer thickness //Materials Science and Engineering: A. – 2015. – Vol. 632. – pp. 137-146.
7. Seita M. et al. Selective ion-induced grain growth: Thermal spike modeling and its experimental validation //Acta materialia. – 2013. – Vol. 61. – №. 16. – pp. 6171-6177.

**СТЕРЕОТАКСИЧЕСКАЯ ЛУЧЕВАЯ ТЕРАПИЯ ПРИ ЛЕЧЕНИИ МЕТАСТАЗОВ
ГОЛОВНОГО МОЗГА**С.И. Крылов, Е.С. Сухих

Научный руководитель: старший преподаватель, к. ф-м. н., Е.С. Сухих
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050
E-mail: splinterfull10905@gmail.com

STEREOTACTIC RADIOTHERAPY IN THE TREATMENT OF BRAIN METASTASESS.I. Krylov, E.S. Sukhikh

Scientific Supervisor: senior lecturer, PhD, E.S. Sukhikh
National Research Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050
E-mail: splinterfull10905@gmail.com

***Abstract.** This thematic review is part of a larger, comparative dosimetric analysis of the evaluation of treatment plans created by different modulated intensity irradiation, which is delivered by means a linear accelerator for the treatment of multiple metastases in the brain.*

There is currently no consensus as to which method is dosimetrically better. A further study will be aimed at determining the dosimetric advantages of each irradiation technique to introduce additional certainty into the planning process.

Введение. Метастазы головного мозга встречаются у 10-20% взрослых пациентов с онкологическими заболеваниями и составляют 1,5-2 % всех злокачественных новообразований.

Наиболее часто метастазы дают опухоли легких, молочной железы, почек и меланомы «злокачественная опухоль кожи».

Частота диагностики метастазов в головном мозге возрастает по мере улучшения методов визуализации и раннего выявления, а также более длительной жизни пациентов из-за улучшения локального контроля над первичными раковыми заболеваниями [1].

Общие терапевтические подходы включают химиотерапию, хирургию, лучевую терапию всего мозга «WBRT», стереотаксическую радиохиргию «SRS» и комбинацию этих методов.

Преимущества хирургического вмешательства считается радикальным лечением, надежным для облегчения неврологических симптомов с установлением местного контроля. Однако хирургическая резекция является инвазивной процедурой и имеет ряд противопоказаний: состояние больного «анамнез», возраст, отказ самого пациента от операции.

При WBRT следует учитывать долгосрочное неблагоприятное воздействие на нейрокогнитивную функцию, которое является основным сдерживающим фактором для пациентов, которые могут жить больше полугода.

У пациентов с несколькими метастатическими поражениями с размерами менее < 3 см, особенно если первичная опухоль считается резистентной к лучевой терапии, рекомендуется стереотаксическая

радиохирургия. Стереотаксическая радиохирургия - это область лучевой терапии, которая подразумевает точное подведение дозы за 1- 4 фракции.

В настоящее время метастазы головного мозга являются наиболее распространенным показанием для SRS. SRS позволяет улучшить локальный контроль для радиорезистентных поражений, которые менее чувствительны к WBRT, такие как метастазы почек и меланома, и это позволяет уменьшить или отсрочить использование WBRT в качестве более позднего лечения без возможных побочных эффектов [2].

Популярность неинвазивной хирургии головного мозга растет из-за значительно улучшенных технологий визуализации и алгоритмов оптимизации доставки дозы.

В связи с появлением нескольких методик доставки дозы, позволяющие доставлять крупные дозы за фракцию, стало необходимо исследовать их на предмет оптимального распределения поглощенной дозы в объеме опухоли, что приведет к улучшению эффективности лучевой терапии, т.е. локального контроля над опухолью при минимальной лучевой нагрузке на критические органы.

Материалы и методы исследования. Системы планирования лечения различаются с точки зрения их алгоритмов оптимизации и расчета дозы, которые могут приводить к существенно различным распределениям доз.

Существует несколько методик облучения, которые могут быть использованы для неинвазивной радиохирургии на базе линейного ускорителя. Краткая информация о режимах доставки дозы представлена в виде таблицы 1.

Таблица 1

Режимы доставки дозы

Режим доставки	Движение гантри при включенном пучке (режим)	Скорость гантри	Движение МЛК при включенном пучке (режим)	Мощность дозы
Step and Shoot IMRT «SS IMRT»	фиксированный	постоянная	фиксированный	переменная
dMLC «SW MLC»	фиксированный	постоянная	динамический	переменная
VMAT	динамический	переменная	динамический	переменная
DCAT	динамический	переменная	динамический	постоянная

Система планирования «Мопасо» использует расчет дозы методом Монте-Карло. Данное программное обеспечение дает возможность работать с любыми из четырех режимов доставки дозы, ранее упомянутые в таблице 1. Эти режимы доставки могут обеспечить высокую степень конформности для стереотаксической радиохирургии [3, 4].

Результаты. Существует ряд исследований, в которых сравнивались планы, поставляемые с помощью «dMLC» и «SS IMRT». Данные показывают сопоставимые конформные дозные распределения с минимальным облучением прилегающих здоровых тканей [5, 6]. Режим «dMLC» способен воспроизводить планы с клинически приемлемыми результатами при радиохирургии 6 метастазов головного мозга «см. рисунок 1».

Некоторые авторы в своих исследованиях сравнивали IMRT «SS IMRT и SW MLC» и VMAT для различных локализаций опухоли, но результаты одних исследований конфликтуют с другими исследованиями.

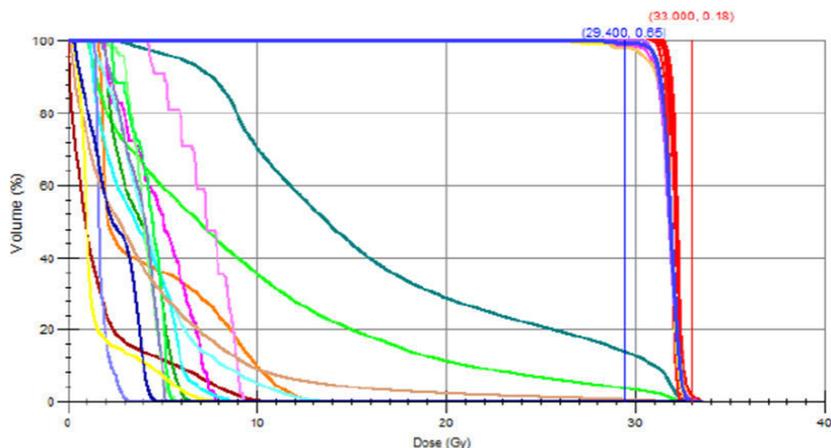


Рис. 1. Гистограмма доза-объем для методики доставки дозы IMRT dMLC

Уменьшение MU «мониторные единицы», достигнутое с использованием VMAT, частично, относится к одной из основных проблем IMRT. В настоящее время нет консенсуса относительно того, какой метод лучше, с точки зрения распределения поглощенной дозы.

Заключение. Несоответствие результатов между различными исследованиями, возможно, было связано с различием в выборе параметров пучка, алгоритме расчета дозы и методе оптимизации плана «речь идет о различных системах планирования».

Какой метод доставки дозы наиболее подходит, будет зависеть от таких факторов, как: число мишеней, объем и формы мишеней, а также расположение критических органов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lin X., DeAngelis L. M. Treatment of brain metastases //Journal of clinical oncology. – 2015. – Т. 33. – №. 30. – С. 3475-3484.
2. Lippitz B. et al. Stereotactic radiosurgery in the treatment of brain metastases: the current evidence //Cancer treatment reviews. – 2014. – Т. 40. – №. 1. – С. 48-59.
3. Iqbal K. et al. Treatment planning evaluation of sliding window and multiple static segments technique in intensity modulated radiotherapy //Reports of Practical Oncology & Radiotherapy. – 2013. – Т. 18. – №. 2. – С. 101-106.
4. Frakes J. M. et al. Potential role for LINAC-based stereotactic radiosurgery for the treatment of 5 or more radioresistant melanoma brain metastases //Journal of neurosurgery. – 2015. – Т. 123. – №. 5. – С. 1261-1267.
5. Sahgal A. et al. Phase 3 trials of stereotactic radiosurgery with or without whole-brain radiation therapy for 1 to 4 brain metastases: individual patient data meta-analysis //International Journal of Radiation Oncology• Biology Physics. – 2015. – Т. 91. – №. 4. – С. 710-717.
6. Chui C. S. et al. Delivery of intensity - modulated radiation therapy with a conventional multileaf collimator: Comparison of dynamic and segmental methods //Medical Physics. – 2001. – Т. 28. – №. 12. – С. 2441-2449.

**АНАЛИЗ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ
ПОЛОСЫ ν_9 МОЛЕКУЛЫ $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$**

А.В. Кузнецов

Научный руководитель: профессор, к. ф.-м. н. О.В. Громова
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050
E-mail: avk93@tpu.ru

ANALYSIS OF HIGH-RESOLUTION SPECTRA OF THE $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ MOLECULE: THE ν_9 BAND

A.V. Kuznetsov

Scientific Supervisor: Prof., Dr. O.V. Gromova
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050
E-mail: avk93@tpu.ru

***Abstract.** High accurate, $(1-2) \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$, ro-vibrational spectra of the $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ molecule in the region of 3000 – 3200 cm^{-1} were recorded for the first time with Fourier transform interferometers Bruker IFS 120 HR and analyzed.*

Введение. Изучая спектры молекул, можно получить подробные сведения об их вращательных и колебательных уровнях энергии. Знание этих уровней энергий дает точные значения межатомных расстояний, частот колебаний, структурные постоянные, внутримолекулярное силовое поле и другие величины, которые характеризуют структуру молекул. Анализ колебательно-вращательных спектров высокого разрешения позволяет определить систему уровней энергии молекулы, найти спектроскопические постоянные, из которых впоследствии могут быть определены структурные параметры и потенциальная функция молекулы [1].

Молекула Этилена и ее изтопомеры представляют большой интерес для спектроскопистов в изучении ее колебательно-вращательной структуры. Исследование микроструктуры этилена важно для разнообразных академических и прикладных задач. Его роль в области экологии, физиологии и биохимии является предметом интенсивных исследований, например, этилен действует как гормон в растениях, он может являться прототипом большого числа органических молекул. Также этилен является составляющей структуры атмосферы Земли, что оказывает значительное влияние на глобальный климат и атмосферную химию. Еще одно важное положение занимает молекула этилена в астрофизических исследованиях и планетологии, это связано с тем, что он в значительных количествах присутствует в атмосферах таких планет, как Сатурн, Титан, Юпитер и Нептун [2]. Также молекула этилен может являться прототипом большого числа органических молекул. В связи с вышесказанным, целью данной работы является анализ колебательно-вращательных спектров высокого разрешения молекулы этилена $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ полосы ν_9 .

Общая характеристика молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$. В этом исследовании наше внимание сосредоточено на изотопологе этилена – $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$. Группа симметрии молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ изоморфна группе D_{2h} и имеет 8 неприводимых представлений [3]. Центр полосы составляет 3093,7986 cm^{-1} .

Исследуемая молекула имеет ось симметрии ниже третьего порядка, поэтому она является молекулой типа ассиметричного волчка, то есть три главных равновесных момента инерции молекулы различны. Поэтому, гамильтониан представляется в виде [4]:

$$H^n = E^n + \left[A^n - \frac{1}{2}(B^n + C^n) \right] J_z^2 + \frac{1}{2}(B^n - C^n) J^2 + \frac{1}{2}(B^n + C^n) J_{xy}^2 - \Delta_K^n J_z^4 - \Delta_{JK}^n J_z^2 J^2 - \Delta_J^n J^4 - \delta_K^n [J_z^2, J_{xy}^2] - 2\delta_J^n J^2 J_{xy}^2 + H_K^n J_z^6 + H_{KJ}^n J_z^4 J^2 + H_{JK}^n J_z^2 J^4 + H_J^n J^6 + [J_{xy}^2, h_K^n J_z^4 + h_{JK}^n J^2 J_z^2 + h_J^n J^4] + L_K^n J_z^8 + L_{KKJ}^n J_z^6 J^2 + L_{JK}^n J_z^4 J^4 + L_{JJK}^n J_z^2 J^6 + L_J^n J^6 + [J_{xy}^2, l_K^n J_z^6 + l_{KJ}^n J_z^4 J^2 + l_{JK}^n J_z^2 J^4 + l_J^n J^6] + \dots \quad (1)$$

Равновесная конфигурация молекулы и фундаментальное колебание ν_{11} представлены на рисунке 1 и 2, соответственно.

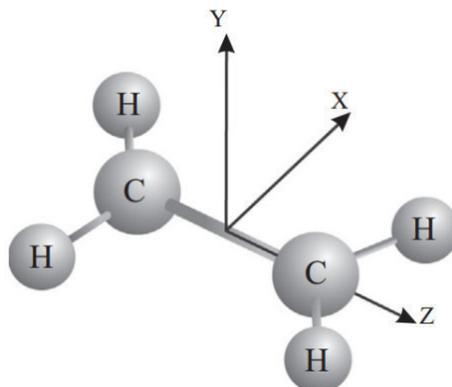


Рис. 1. Равновесная конфигурация молекулы

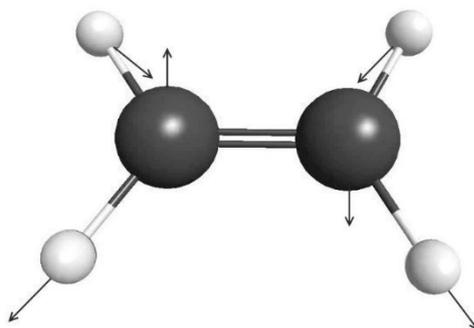


Рис. 2. Фундаментальное колебание ν_9

Экспериментальные данные. Исследованный спектр молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ (рисунок 3) был снят на фурье-спектрометре Bruker IFS 120HR. Для регистрации спектра использовали изотопически чистый образец с химической чистотой более 99% (образец, закупленный в Cambridge Isotope Laboratories). Спектр проводили в белой ячейке из нержавеющей стали с длиной основания 1 м и максимальной длиной пути 50 м. Экспериментальные данные захваченного спектра в диапазоне 3000-3200 cm^{-1} приведены в таблице 1.

Таблица 1

Экспериментальные данные

Разрешение, cm^{-1}	Время измерений, ч	Число сканирований	Давление, П	Температура, К
0,0025	4-16	110-400	17-180	300
Источник	Beam-Splitter	Опт. длина пути, м	Апертура, мм	Калибровочный газ
Globalar	KBr	50	1,5	$^{13}\text{C}^{16}\text{O}_2$

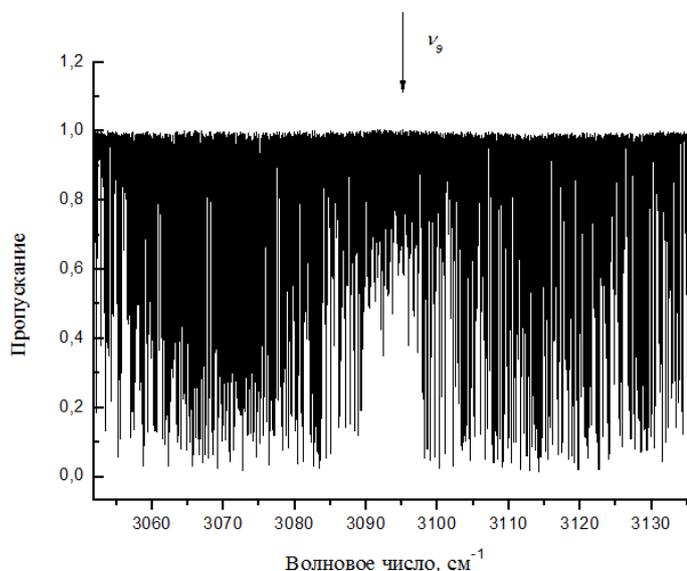


Рис. 3. Спектр молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$

Результаты анализа спектра высокого разрешения. Исследуемая полоса ν_9 принадлежит группе симметрии A -типа и имеет следующие правила отбора: $\Delta J = 0, \pm 1$; $\Delta K_a = 0, \pm 2$; $\Delta K_c = 0, \pm 2$. Информация об энергетических уровнях основного колебательного состояния была получена из работы [5]. В результате работы был проинтерпретирован спектр молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ в районе полосы ν_9 . (максимальное значение квантового числа $J = 45$ и максимальное значение квантового числа $K_a = 17$. В ходе работы было проинтерпретировано около 3122 и определено 841 энергий для возбужденного состояния ν_9 . Для анализа экспериментальных данных использовалась модель эффективного оператора в виде (1).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Betz L., Ethylene in IRC +10216 // *Astrophys. J.* – 1981. – V. 244. – P. L103-L105.
2. Cernicharo J., Heras A.M., Pardo J.R., Tielens A.G.G.M., Guelin M., Dartois E., Neri R., Walters L.B.F.M., Methylpolyynes and small hydrocarbons in CRL 618 // *Astrophys. J.* – 2001. – V. 546. – P. L127-L130.
3. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S. High resolution ro-vibrational analysis of interacting bands ν_4 , ν_7 , ν_{10} , and ν_{12} of $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$: *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, Vol. 49A, No.2. – 2016 г.
4. Watson K.G Determination of centrifugal coefficients of asymmetric – top molecules: *J. Chem. Phys.* V. 46. – 1967. – 1949 p.
5. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Aslapovskaya Yu.S., Horneman V.M., High resolution spectroscopic study of C_2H_4 : Re-analysis of the ground state and ν_4 , ν_7 , ν_{10} , and ν_{12} vibrational bands // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* – 2013. – V. 118. – P. 14-25.

**СТРУКТУРА И СВОЙСТВА КЕРАМИЧЕСКИХ КОМПОЗИТОВ ZrO_2 , МОДИФИЦИРОВАННЫХ
РАЗЛИЧНЫМИ АРМИРУЮЩИМИ НАПОЛНИТЕЛЯМИ**

А.А. Леонов, В.А. Цуканов, В.Д. Пайгин

Научный руководитель: профессор, д.т.н., О.Л. Хасанов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: laa91@tpu.ru

**STRUCTURE AND PROPERTIES OF ZrO_2 CERAMIC COMPOSITES, MODIFIED BY VARIOUS
REINFORCED FILLERS**

A.A. Leonov, V.A. Tsukanov, V.D. Paygin

Scientific Supervisor: Prof., Dr. O.L. Khasanov

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: laa91@tpu.ru

***Abstract.** The effect of the addition of single wall carbon nanotubes and alumina nanofibers on the microstructural and mechanical performance of 3 mol% yttria stabilized zirconia have been investigated in the present study. Samples were obtained by spark plasma sintering.*

Введение. В настоящее время спрос на инновационные и высокоэффективные керамические материалы неизменно растет. В то время как керамика имеет внутреннюю хрупкость и, соответственно, низкую устойчивость к повреждениям, армирование волокнами или углеродными нанотрубками керамической матрицы приводит к созданию конструкционных материалов с выдающимися характеристиками. Армирующие волокна/нанотрубки диссипируют энергию приложенной нагрузки при растрескивании, отслоении и вытягивании в процессе разрушения керамической матрицы, что улучшает прочность и трещиностойкость керамических композитов. Сочетание преимуществ керамики, таких как высокая твердость, высокая термостойкость и коррозионная стойкость с дополнительными характеристиками, получаемыми за счет армирования, такими как высокая устойчивость к разрушению и трещиностойкость, значительно расширяет область применения высокоэффективной керамики. В связи с этим, целью настоящей работы является исследование керамических композитов на основе ZrO_2 , армированных одностенными углеродными нанотрубками (ОУНТ) и нановолокнами (НВ) Al_2O_3 .

Материалы и методы исследования. В качестве исходного сырья использовали нанопорошок частично стабилизированного иттрием диоксида циркония (TZ-3YS) коммерческой марки Tosoh (Япония). Армирующими наполнителями являлись ОУНТ Tuball и НВ оксида алюминия Fibrall, предоставленные группой компаний OCSiAl (Новосибирск, Россия). Смешивание исходных компонентов производили в несколько этапов. В первую очередь нужно было отделить нанотрубки/нановолокна друг от друга. Для этого использовали ультразвуковое диспергирование (УЗ-ванна, 110 Вт, 35 кГц) в среде этилового спирта в течение 30 мин. После этого к приготовленным суспензиям, порциями добавляли нанопорошок диоксида циркония и продолжали ультразвуковое диспергирование еще 30 мин. По истечению времени УЗ-диспергирования, обработанные

композиционные суспензии ставили на магнитную мешалку и осуществляли перемешивание в течение 30 мин. Две готовые суспензии с матричной основой ZrO_2 , содержащие 1 масс.% ОУНТ и 1 масс.% НВ, высушивали 3 часа в сушильном шкафу. Синтез композитов ZrO_2 /ОУНТ и ZrO_2 /НВ производили электроимпульсным плазменным спеканием на установке SPS 515S (SPS Syntex, Япония) при следующих условиях: температура спекания 1500 °С, скорость нагрева 100 °С/мин, время изотермической выдержки при максимальной температуре 10 мин и давление прессования 40 МПа. Для сравнения спекалась неармированная керамика ZrO_2 при тех же условиях. Экспериментальная плотность спеченных образцов определялась геометрическим методом, затем рассчитывалась относительная плотность $\rho_{отн}$, %. Измерения микротвердости H_V проводились на приборе ПМТ-3М (ЛОМО, Россия) с помощью алмазной пирамиды Виккерса при нагрузке 500 г. Трещиностойкость или критический коэффициент интенсивности напряжений K_{IC} определяли методом индентирования с помощью твердомера ТП-7Р-1 при нагрузке 5 кг и оценивали по методами Anstis и Niihara [1, 2]. Микроструктура образцов исследовалась на сканирующем электронном микроскопе JSM 7500FA (JEOL, Япония).

Результаты и их обсуждение. На рисунке 1 представлены СЭМ-изображения исходного воздушно-сухого нанопорошка и поперечных сколов спеченных образцов.

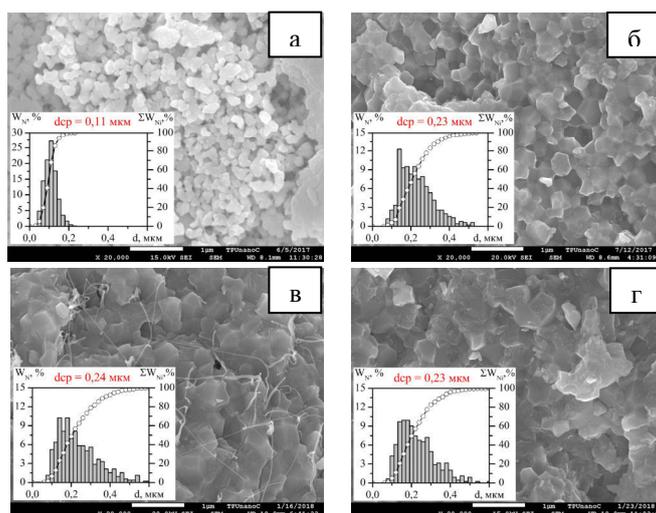


Рис. 1. СЭМ-изображения: а) нанопорошок ZrO_2 , б-г) сколы неармированной керамики ZrO_2 , композита с ОУНТ и композита с НВ, соответственно.

Анализируя представленные изображения, определили средний размер частиц и зерен, а также построили распределения частиц/зерен по размерам. Размер зерен спеченных образцов практически одинаков ($\sim 0,23$ мкм), это говорит о том, что армирующие добавки в меньшей степени влияют на эту характеристику. На сколах керамики ZrO_2 и композита с ОУНТ (рис. 1б,в) наблюдается преимущественно межкристаллитное разрушение. Из рисунка 1в видно, что ОУНТ сохраняют свою структуру даже после высокотемпературного спекания. Нанотрубки хаотично ориентированы и довольно равномерно локализованы в объеме матрицы диоксида циркония, кроме того они имеют достаточно гибкую структуру, что позволяет им изгибаться и формировать мостиковые перемычки между частицами, опутывать их, образуя каркасную сетку. Для композита с НВ (рис. 1г) наблюдается разрушение смешанного характера (межкристаллитное и транскристаллитное), где в основном межкристаллитное разрушение проявляется на спекшихся НВ оксида алюминия. Коэффициент теплового расширения Al_2O_3

($\sim 9 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$) ниже, чем у ZrO_2 ($\sim 11 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$), это означает, что растягивающее напряжение существует на границе раздела между Al_2O_3 и ZrO_2 , что приводит к тенденции отклонения трещин вдоль границ зерен. В таблице 1 представлены значения физико-механических свойств исследуемых образцов в сопоставлении с подобными материалами. Из таблицы видно, что исследуемые спеченные образцы обладают высокой плотностью ($\sim 99\%$). Микротвердость композита с ОУНТ ниже на 19% по сравнению с неармированной керамикой, а для композита с НВ напротив, значение H_V повысилось на 4%. Тем не менее, улучшение трещиностойкости наблюдается для обоих композитов: на 36% для $\text{ZrO}_2/\text{ОУНТ}$ и на 24% для $\text{ZrO}_2/\text{НВ}$ (значения K_{IC} по Anstis). Сравнивая свойства полученных образцов с аналогичными материалами видно, что значения H_V и K_{IC} превышают указанные величины, как для неармированной керамики ZrO_2 , так и для композитов $\text{ZrO}_2/\text{ОУНТ}$ и $\text{ZrO}_2/\text{НВ}$.

Таблица 1

Свойства полученных образцов в сопоставлении с другими работами.

	ZrO_2	1% ОУНТ	1% НВ	[3]		[4]	
				ZrO_2	1% ОУНТ	ZrO_2	1% НВ
d_{cp} , мкм	0,23	0,24	0,23	0,22	0,22	-	-
$\rho_{отн}$, %	99,30	98,73	99,84	100,00	100,00	99,00	98,00
H_V , ГПа	14,72	11,95	15,30	12,70	12,60	14,00	13,86
K_{IC} , МПа·м ^{1/2}	*А 3,56 *N 5,84	А 4,84 N 6,97	А 4,40 N 6,79	А 4,30	А 4,40	N 5,73	N 6,25

*А и N – трещиностойкость по методам Anstis и Niihara, соответственно.

Выводы. Исследованы композиты $\text{ZrO}_2/\text{ОУНТ}$ и $\text{ZrO}_2/\text{НВ}$, полученные электроимпульсным плазменным спеканием. Показано, что композит с ОУНТ обладает повышенной трещиностойкостью (4,84 МПа·м^{1/2}), но заниженной микротвердостью. Снижение H_V , как правило, связано с уменьшением композиционной теоретической плотности и с ослаблением межфазной связи, которое проявляется за счет переплетения зерен ZrO_2 нанотрубками, что приводит к уменьшениям площади прямого контакта и силы сцепления зерен между собой. Установлено, что композит $\text{ZrO}_2/\text{НВ}$ имеет улучшенные значения H_V и K_{IC} по сравнению с неармированной керамикой ZrO_2 , за счет известных механизмов упрочнения, таких как разрыв волокна, вытягивание волокна и соединение трещин в композите «мостиками».

Авторы выражают благодарность Егорову Юрию Петровичу, к.т.н., заведующему лабораторией Механических испытаний и металлографического анализа материалов (ТПУ) за помощь в проведении исследований трещиностойкости образцов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Anstis G.R., Chantikul P., Lawn B.R. A critical evaluation of indentation techniques for measuring fracture toughness: I, Direct crack measurements // J. Am. Ceram. Soc. – 1981. V. 64. P. 533–538.
2. Niihara K. A fracture mechanics analysis of indentation-induced Palmqvist crack in ceramics // J. Mater. Sci. Lett. – 1983. – V. 2. – P. 221–223.
3. Poyato R., Macías-Delgado J., García-Valenzuela A., Gallardo-López Á. Mechanical and electrical properties of low SWNT content 3YTZP composites // J. Eur. Ceram. Soc. – 2015. – V. 35. – P. 2351–2359.
4. Hussainova I., Drozdova M., Pérez-Coll D., et al. Electroconductive composite of zirconia and hybrid graphene/alumina nanofibers // J. Eur. Ceram. Soc. – 2017. – V. 37. – P. 3713–3719.

**КИЛЬВАТЕРНОЕ УСКОРЕНИЕ В МНОГОСЛОЙНОМ ВОЛНОВОДЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ
КОЛЬЦЕВОГО ПУЧКА**

Н.А. Лесив, К.Р. Мухамедгалиев

Научный руководитель: доцент, к.ф.-м.н. А.М. Альтмарк

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»,

Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Профессора Попова, 5, 197022

E-mail: nikita.lesiv@gmail.com

**WAKEFIELD ACCELERATION IN MULTILAYER DIELECTRIC WAVEGUIDE WITH USAGE OF
RING BEAM**

N.A. Lesiv, K.R. Mukhamedgaliyev

Scientific Supervisor: Assoc. Prof., PhD A.M. Altmark

St. Petersburg Electrotechnical University "LETI", Russia, St. Petersburg, Professor Popov str., 5, 197022

E-mail: nikita.lesiv@gmail.com

***Abstract.** In this paper, we simulated the process of wakefield acceleration of electron Gaussian bunch by a circular electron bunch. As a result, one of the prospective wakefield acceleration methods of electron bunches with an energy transformation coefficient of more than 2 is proposed.*

Введение. В последнее десятилетие получили распространение кильватерные методы ускорения [1] заряженных частиц. Это связано с тем, что в кильватерных методах ускоряющий градиент поля выше, чем классических методах ускорения. Главный принцип кильватерного ускорения заключается в создании большого ускоряющего поля E_z при помощи пучка – драйвера и помещении в это поле ускоряемого пучка в нужной фазе волны. Целью данной работы является моделирование процесса кильватерного ускорения электронного сгустка кольцевым сгустком.

Метод исследования. В данном исследовании для моделирования процесса кильватерного ускорения электронного сгустка кольцевым сгустком используется метод макрочастиц [2].

Метод макрочастиц – метод моделирования динамики заряженных частиц. Сгусток заряженных частиц разбивается на макрочастицы. Каждой макрочастице присваивается заряд равный заряду сгустка, отнесенный к количеству макрочастиц в сгустке, а масса – равной массе электрона. Поле, создаваемое сгустком, вычисляется как сумма полей всех макрочастиц.

Постановка задачи. В диэлектрический волновод (рис. 1), состоящий из двух коаксиальных цилиндрических диэлектрических трубок (желтый цвет), влетают два электронных сгустка: кольцевой (синий) и гауссов сгусток (красный) (сначала влетает кольцевой сгусток, за ним - гауссов). При определенном подборе параметров волновода и расстояния между сгустками возможна передача энергии от кольцевого сгустка к гауссову (ускоряемому). Такой процесс называется ускорением гауссова сгустка. Ускорение гауссова сгустка происходит из-за того, что кольцевой сгусток возбуждает в диэлектрическом волноводе излучение Вавилова-Черенкова, в поле которого происходит увеличение энергии ускоряемого сгустка. Кольцевой сгусток обладает малой энергией и в дополнении к этому еще имеет радиальное смещение относительно оси волновода. Это обстоятельство определяет поперечную неустойчивость кольцевого пучка, обусловленное возбуждением несимметричных НЕМ мод [3].

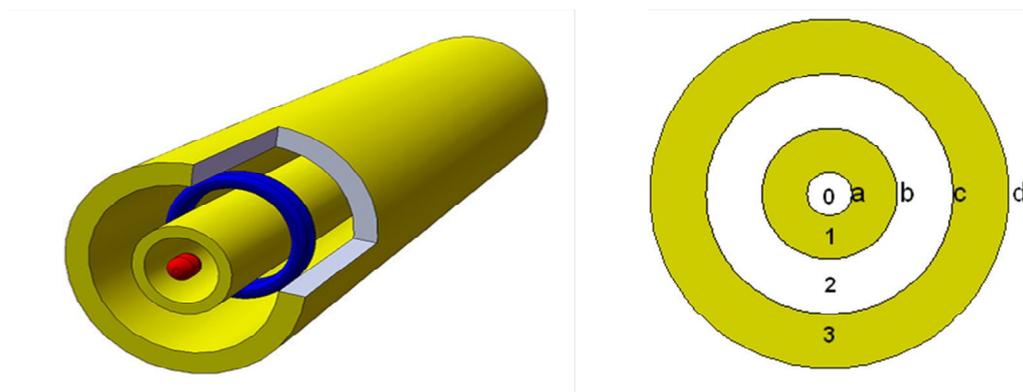


Рис. 1. Диэлектрический волновод

Результаты. Моделирование было проведено со следующими параметрами сгустков и волновода:

Таблица 1

Параметры сгустков

Параметры кольцевого сгустка	Значение параметров	Параметры гауссова сгустка	Значение параметров
Заряд	100 нКл	Заряд	0,1 нКл
Продольная длина	0,4 см	Продольная длина	0,1 см
Радиус кольца	0,8 см	Поперечная длина	0,01 см
Энергия	15 МэВ	Энергия	150 МэВ
Число макрочастиц	400	Число макрочастиц	400
Радиальное смещение	0.03 см		

Таблица 2

Параметры волновода

Параметры волновода	Значение параметров
a	0,2 см
b	0,6 см
c	1 см
d	1,4 см
Диэлектрическая проницаемость	400

начальное расстояние между кольцевым и гауссовым сгустками – 2,4 см.

Результаты моделирования представлены на рис. 2 – 4.

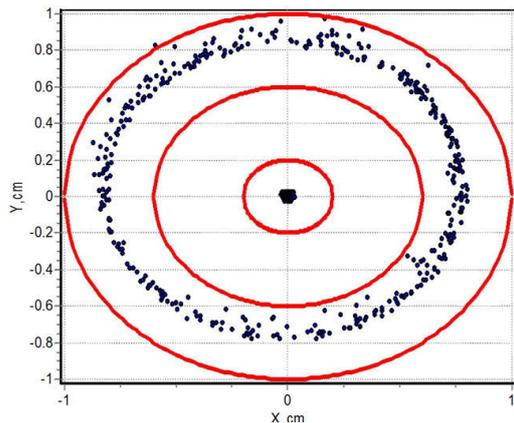


Рис. 2. Поперечное сечение волновода и систем сгустков в конце моделирования

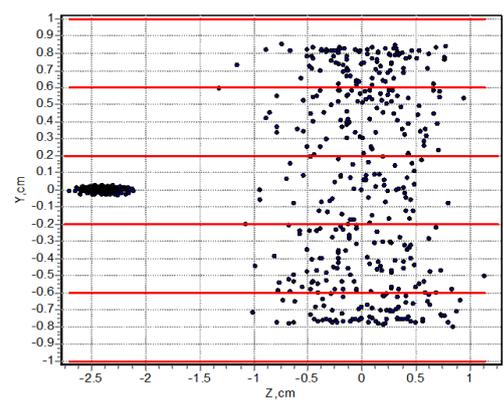


Рис. 3. Продольное сечение волновода и система сгустков

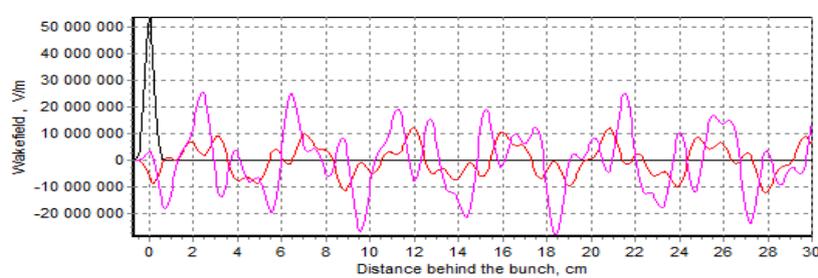


Рис. 4. Поле, создаваемое кольцевым пучком в вакуумной полости и вакуумном канале (розовая линия – поле внутри центрального вакуумного канала, красная линия – поле внутри вакуумного слоя где летит кольцевой сгусток)

Из рис. 4 видно, что коэффициент трансформации (коэффициент передачи энергии от ведущего сгустка к ускоряемому) высокий (по сравнению с классической схемой, где он равен 2 [1]). Рис.2 соответствует окончанию вычислений, так как макрочастицы кольцевого сгустка коснулись стенок волновода. Исходя из этого условия, мы получили максимальную длину пролета – 30 см. Отсюда можно получить энергию, которую приобретает ускоряемый сгусток путем умножения его заряда на максимальную длину и значение ускоряющего кильватерного поля

Заключение. В данной работе было произведено моделирование процесса кильватерного ускорения электронного сгустка кольцевым сгустком. Предложенная схема кильватерного ускорения позволяет получать достаточно высокий коэффициент трансформации [4] (больше 2). Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (проект 3.6522.2017).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Rosenzweig J. B., Schoessow P., Cole B., Gai W. et al. 1989 Phys. Rev. A 39, 1586
2. Sheinman I., Kanareykin A., Sotnikov G., RUPAC, MOPPA010, 2012, pp. 266-268.
3. Altmark A M and Kanareykin A D. J. Phys.: Conf. Ser. 357 012001
4. Sotnikov G.V., Marshall T.C., Hirshfield J.L., and Shchelkunov S.V. 2010 Proc. AAC'10, AIP Conference Proceedings, 1299, NY, 342

**ЭВОЛЮЦИЯ ДЕФЕКТНОЙ СТРУКТУРЫ ЦИРКОНИЕВОГО СПЛАВА ZR-1NB ПОСЛЕ
ХОЛОДНОЙ ПРОКАТКИ**А.Д. Ломыгин, К.Д. Уразова

Научный руководитель: Ю.С. Бордулев

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: lomyginanton141@gmail.com

**EVOLUTION OF THE ZIRCONIUM ALLOY ZR-1NB DEFECT STRUCTURE AFTER COLD
ROLLING**A.D. Lomygin, K.D. Urazova

Scientific Supervisor: Yu.S. Bordulev

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: lomyginanton141@gmail.com

***Abstract.** Zirconium alloys are actively used in nuclear power engineering. During the operation of these alloys, it is necessary to know the change in structural, mechanical and physical characteristics when using material in corrosive environments. In this regard, it is necessary to study the occurrence of certain defects in the material and their effect. Such defects include dislocations. This study is aimed to study the processes of the appearance and distribution of dislocations in a material by positron annihilation spectroscopy. As a result of this work, the lifetime of positrons in the dislocation of zirconium was determined and the character of dislocation distribution at different degrees of deformation was presented.*

Введение. Циркониевые сплавы являются основным конструкционным материалом для элементов активных зон ядерных реакторов. Сплавы циркония, такие как Zr-1Nb (Э110) Zr-2,5Nb (Э125), используются при изготовлении оболочек ТВЭЛов, топливных каналов, направляющих трубок, топливных контейнеров. Данные изделия в процессе эксплуатации подвергаются воздействию различных факторов, приводящих в деградации сплавов и накоплению дефектов. Для понимания сложных дефектов необходимо понять образование простых дефектов, таких как вакансии, вакансионные кластеры, дислокации.

На сегодняшний день одним из перспективных методов исследования и контроля структурных дефектов в системах металл-водород являются методы электрон-позитронной аннигиляции (ЭПА) [1]. Время жизни позитронов в бездефектной решетке и вакансии циркония известно и составляет 165 ± 5 и 252 ± 5 пс [2], соответственно. Однако, характеристики позитронной спектроскопии в дислокациях циркония до сих пор не были определены.

Следовательно, **целью** данной работы является позитронная спектроскопия эволюции дефектной структуры циркониевого сплава Э110 после холодной прокатки.

Материалы и методы. В ходе эксперимента был использован циркониевый сплав Zr-1Nb (Э110). Образцы были отожжены в вакууме в течении 54 часов при температуре 854°C с целью достижения бездефектной структуры [2]. Далее образцы были подвергнуты пластической деформации методом

холодной прокатки для создания линейных дефектов типа «дислокация». Прокатка проводилась в 3 режимах: 2%, 5% и 10% деформации. Для определения времени жизни позитронов были набраны спектры времени жизни позитронов для каждого уровня деформации и для бездефектного образца. Спектрометрия времени жизни позитронов (СВЖП) основана на измерении отрезка времени между двумя событиями: рождением и аннигиляцией позитронов. Для повышения достоверности полученных результатов, данные образцы были также исследованы методами доплеровского уширения аннигиляционной линии позитронов (ДУАЛ), рентгеноструктурным анализом (РСА) и просвечивающей электронной микроскопией (ПЭМ). В методе РСА спектры были обчислены методом Ритвельда и определены микронапряжения для всех образцов.

Результаты. Зависимость среднего времени жизни позитронов от уровня деформации и микронапряжений представлена на Рисунке 1. Из представленных данных видно, что значение, как времени жизни, так и микронапряжений резко возрастает при 2% деформации и продолжает расти при 5 % деформации. Это является ожидаемым результатом, т.к., согласно теории методов позитронной аннигиляции, увеличение плотности дефектов путем деформации увеличивает вероятность захвата позитрона дислокацией, тем самым увеличивая среднее время жизни. Однако, можно заметить, что дальнейшее увеличение значения деформации приводит к снижению среднего времени жизни позитронов. Далее спектры времени жизни позитронов были разложены на 2 компоненты с применением стандартной модели захвата. Интенсивность данной компоненты имеет ту же динамику, что и среднее время жизни позитронов, достигая максимума (88 %) при уровне деформации 5 % и снижаясь при 10%, что видно из Рисунка 2.

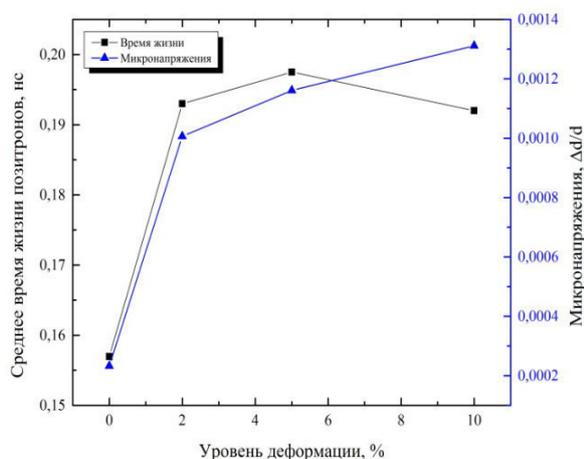


Рис. 1. Зависимость среднего времени жизни позитронов и микронапряжений от уровня деформации циркониевого сплава Э110

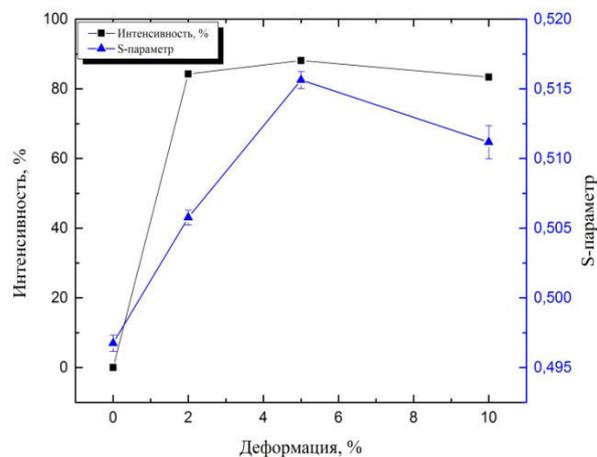


Рис. 2. Зависимость интенсивности компоненты дислокаций и S - параметра от уровня деформации циркониевого сплава Э110

Это снижение является свидетельством процесса формирования т.н. «дислокационных ячеек», которое было обнаружено при высоких степенях деформации металлов.

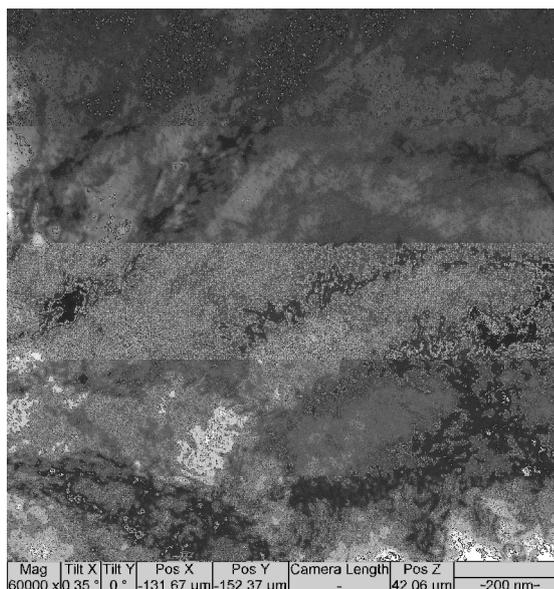


Рис. 3. Дислокационные ячейки в циркониевом сплаве Э110 при 10% деформации

Фотография полученной структуры, сделанная на ПЭМ представлена на Рисунке 3. Данные «ячейки» представляют собой дислокационно-обогащенные границы и практически бездефектные внутренние области. При формировании подобной структуры с размером ячеек превышающим длину диффузии позитрона (около 100 мкм), вероятность аннигиляции позитронов с дефектом снижается (несмотря на то, что плотность дефектов растет), что снижает как среднее время жизни, так и интенсивность дефектной компоненты. Метод же РСА, имеет гораздо большую площадь анализа, чем длина диффузии позитрона, соответственно, как видно из Рисунка 1, увлечение плотности дислокаций ведет к увеличению микронапряжений, несмотря на формирование дислокационных ячеек. Метод ДУАЛ, являясь методом позитронной спектроскопии, подтверждает сделанное выше заключение.

Заключение. В результате данной работы была изучена дислокационная структура сплава Zr-1Nb (Э110) после холодной прокатки. Был обнаружен процесс формирования «дислокационных ячеек», образующихся при высоких степенях деформации (10%). В результате была впервые выделена компонента времени жизни позитрона в дислокациях, составившая 217 пс, что незначительно превышает время жизни позитронов в дислокационной петле (215 пс) [2].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Графутин В.И., Графутин Е.П. Прокопьев. Применение позитронной аннигиляционной спектроскопии для изучения строения вещества//Приборы и методы исследований. – 2002. – Т. 172. – № 1.
2. Campillo Robles J.M., Plazaola F. Trans Tech Publications . Collection of Data on Positron Lifetimes and Vacancy Formation Energies of the Elements of the Periodic Table 2003; Vols 213-215 ; 141-0.

ВЛИЯНИЕ ВОДОРОДА НА РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ В ЦИРКОНИЕВОМ СПЛАВЕ

Лю Уян, Сюй Шупэн

Научный руководитель: профессор В.В. Ларионов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: 1345995879@qq.com

INFLUENCE OF HYDROGEN ON RELAXATION PROCESSES IN ZIRCONIUM

Liu Wuyang, Xu Shupeng

Scientific Supervisor: Prof., Dr. V.V. Larionov

Tomsk Polytechnic University, Russia, Lenin str., 30, 634050

E-mail: 1345995879@qq.com

Abstract. A calculation is made of the ohmic and phonon relaxation time in hydrogenated zirconium. The law of charge conservation and the dependence of the electrical resistivity of a zirconium alloy on the concentration of hydrogen were used as the basis for the analysis. Analysis of the relaxation time for various concentrations of hydrogen in a zirconium alloy at different temperatures makes it possible to use this parameter to estimate the hydrogen content. It is shown that the relaxation time decreases with increasing hydrogen concentration in zirconium. This is due to an increase in the scattering of charges (protons and electrons) on defects caused by hydrogen saturation.

Введение. Циркониевые сплавы используются в высокотехнологичных узлах и устройствах атомных электростанций в качестве покрытий элементов конструкции активной зоны ядерных реакторов на тепловых нейтронах – оболочки тепловыделяющих элементов, кассеты, каналы, дистанционные решётки и др. [1]. Цель работы исследовать перенос (миграцию) водорода в циркониевом сплаве Э110 методом измерения термоэдс наводороженного циркония. Основной причиной возникновения термоэдс в металлах и сплавах при создании в них градиента температуры является отклонение электронной системы от равновесия [2,3]. Соответствующая термоэдс называется диффузионной, поскольку ее можно рассматривать как результат диффузии носителей тока в поле градиента температуры. Диффузионная термоэдс реального металла определяется механизмом или несколькими механизмами рассеяния носителей тока на фононах, дефектах решетки, примесных атомах, магнонах (в магнитоупорядоченных металлах), границах зерен (в чистых металлах при низких температурах) и т. д., а также электронным спектром, в частности геометрией поверхности Ферми и температурой. Расчет времени релаксации проведен на основе анализа закона сохранения заряда и зависимости электросопротивления циркониевого сплава от концентрации водорода.

Теоретическая часть. В состоянии термодинамического равновесия система водород-металл описывается равновесной функцией распределения $f_0(\vec{r}, \vec{k})$, где \vec{r} и \vec{k} радиус-вектор и волновой вектор частицы, например протона или электрона. Под действием внешнего поля, возникшего в контакте и при нагревании функция распределения меняется, и состояние описывается неравновесной функцией распределения Больцмана $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$, зависящей от времени t . Время релаксации τ позволяет оценить те процессы, которые сопровождают рассеяние электронов проводимости на решетке наводороженного

металла. Это время вычисляют по формуле $\tau = \varepsilon_0 / \sigma$. При этом при наводороживании изменяется проводимость σ металла. Её оценку можно проводить по закону Видемана – Франца по известной величине теплопроводности. Рассматривают следующие виды (механизмы) рассеяния электронов проводимости для расчетов величины E_s термоэдс по формулам:

$$E_s = \frac{1}{eT} \left(\frac{E_\tau(E)}{\tau(E)} - E_F \right) \quad \langle F(E) \rangle = \frac{\int F(E) E (-df_0 / dE) dE}{\int E (-df_0 / dE) dE}$$

Как известно механизм рассеяния определяется как зависимость среднего времени релаксации от энергии и температуры. Следующие виды рассеяния электронов влияют на величину термоэдс: рассеяния на ионизованных примесях, рассеяния на точечных дефектах, рассеяния на нейтральных атомах примеси, рассеяния на акустических фононах примеси и рассеяния на оптических фононах. В данной работе исследовали изменение времени релаксации от концентрации водорода в циркониевом сплаве (рис. 1 и 2).

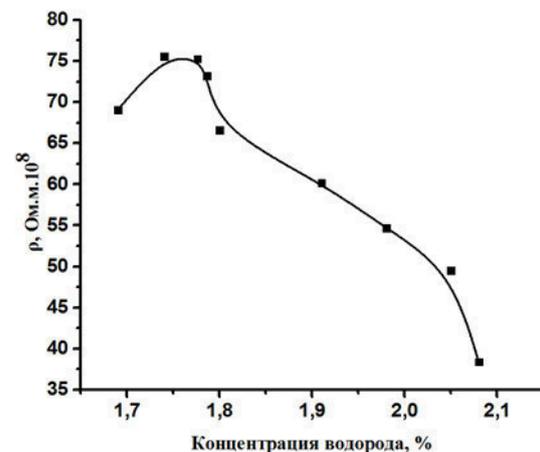
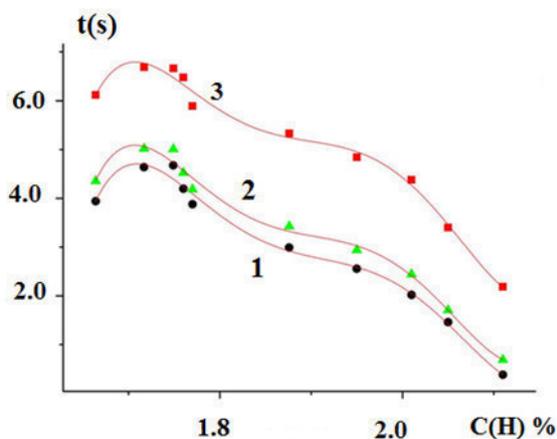


Рис. 1. Зависимость омического времени релаксации от концентрации водорода в цирконии при различных температурах (1- 4.2 К, 2 – 77 К, 3 – 300К, по данным [4])

Рис. 2. Зависимость удельного сопротивления наводороженного циркония от концентрации водорода

Обычно учитывается энергетическая и температурная зависимость времени релаксации $\tau(E, T)$ и закон Видемана – Франца для оценки электропроводность наводороженного циркония

$$\lambda_e^{\text{ZrH}_x} = L_e^{\text{ZrH}_x} \cdot \sigma_{\text{ZrH}_x} \cdot T$$

где σ_{ZrH_x} и $L_e^{\text{ZrH}_x}$ – электропроводность и коэффициент Лоренца электронной проводимости $\varepsilon\text{-ZrH}_x$. Величина $L_e^{\text{ZrH}_x}$ равная $(\pi^2 / 3) (k_B / e) = 2.245 \times 10^{-8} [\text{W} \cdot \Omega / \text{K}^2]$ и не зависит от температуры и концентрации водорода, k_B и e – постоянная Больцмана и элементарный электрический заряд. Электропроводность $\varepsilon\text{-ZrH}_x$ можно вычислить с помощью фононной проводимости ($\lambda_p^{\text{ZrH}_x}$) путем вычитания $\lambda_e^{\text{ZrH}_x}$ из λ^{ZrH_x} . Зависимости представлены на рис. 3 и 4, из которых следует, что фононы и электроны играют большую роль в электропроводности при температурах около 300 и 600 К соответственно.

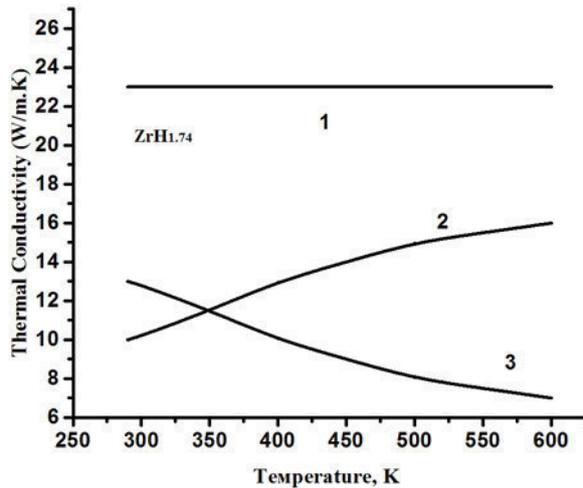


Рис. 3. Температурная зависимость теплопроводности для ϵ - $ZrH_{1.74}$ (1- λ , 2 - λ_e , 3 - λ_p)

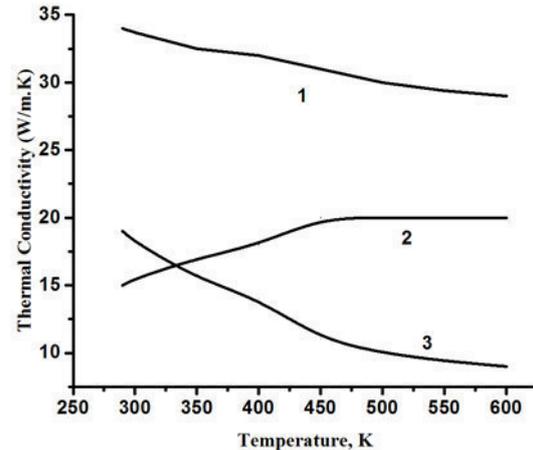


Рис. 4. Температурная зависимость теплопроводности для ϵ - $ZrH_{1.84}$ (1- λ , 2 - λ_e , 3 - λ_p) (расчет)

Полученные данные свидетельствуют о различных вкладах процессов рассеяния в электропроводность циркониевого сплава и соответственно на величину измеряемой термоэдс. **Выводы:**

1. На основе анализа кинетического уравнения переноса Больцмана в качестве начального этапа исследования выделили расчет времени релаксации системы цирконий-водород.
2. Расчет времени релаксации проведен на основе анализа закона сохранения заряда и зависимости электросопротивления циркониевого сплава от концентрации водорода.
3. Проведен анализ времени релаксации для различных концентраций водорода в циркониевом сплаве при различных температурах. Показано, что с увеличением концентрации водорода в цирконии происходит уменьшение времени релаксации. Это связано с увеличением рассеяния зарядов (протонов и электронов) на дефектах, вызванных водородным насыщением.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Альфельд Г, Фелькль И. Водород в металлах: в 2-х т., М.: Мир, 1981. Т. 1. – 457 с.: Т. 2. – 430 с.
2. Lider, A.M., Larionov, V.V., Syrtanov, M.S. Hydrogen concentration measurements at titanium layers by means of thermo-EMF 2016 Key Engineering Materials 683, pp. 199-202.
3. Lider, A., Larionov, V., Kroening, M., Kudiiarov, V. Thermo-Electromotive Force and Electrical Resistivity of Hydrogenated VT1-0 Titanium Alloy 2016 IOP Conference Series: Materials 012004.
4. William M. Mueller, James P. Blackledge, George G. Libowitz. Metal Hydrides. London-NewYork, 1968. С. 282, 309.

ПОЛУЧЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ЭФФЕКТИВНОГО ДИПОЛЬНОГО МОМЕНТА
В АНАЛИТИЧЕСКОМ ВИДЕ ДЛЯ МОЛЕКУЛЫ ТИПА SO_2

Люй Цзюньлинь, А.Г. Зяткова

Научные руководители: д.ф.-м.н., профессор Е.С. Бехтерева

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

e-mail: recharllenlv@gmail.com

ANALYTICAL COMPUTER CALCULATIONS FOR HIGH RESOLUTION STUDY OF SPHERICAL
TOP MOLECULES SPECTRA

Lyu Junlin, A.G. Ziatkova

Scientific Supervisors: Prof. E.S. Bekhtereva, Prof. O.N. Ulenikov

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin av., 30, 634050

e-mail: recharllenlv@gmail.com

Abstract. *The purpose of this experiment was to obtain the parameters of the expansion of effective dipole moment operator of the SO_2 molecule. To realize to the research, method of effective Hamiltonians, theory of symmetry have been used. In result, the analytical view of rotation parameters and first three parameters of effective dipole moment operator have been obtained.*

Введение. Важность исследования колебательно-вращательных спектров заключается в нахождение физико-химических свойств молекул с очень высокой точностью. Анализ спектров позволяет определить уровни энергии молекул, найти спектроскопические постоянные, из которых впоследствии могут быть определены структурные параметры и параметры потенциальной функция молекулы.

Актуальность и постановка задачи: Сказанное ранее позволяет сделать вывод, что колебательно-вращательный спектр является уникальным источником высокоточных данных о важных параметрах молекулы. Однако, для получения такого рода информации необходимо иметь «правильную» теоретическую модель, которая бы хорошо описывала экспериментальные данные. Как показывает практика, для многоатомных молекул это является сложной задачей. В этом случае единственным способом решения проблемы станет использование различных приближений (приближение

Борна-Оппенгеймера, метод эффективных гамильтонианов, учет свойств симметрии). С другой стороны, кроме энергетической структуры, которую позволяет с высокой точностью определить анализ спектра, является важным знание интенсивностей спектральных линий. С прикладной точки зрения это определяется тем, что позволяет на основе экспериментальных данных об интенсивностях получать количественные характеристики среды такие, например, как температура, давление, концентрация. Знание такой зависимости, например, позволит дистанционно исследовать атмосферу планет Солнечной системы на предмет присутствия в них различных молекул, кроме того, определить давление и температуру. Известно, что интенсивность, в квантовой механике пропорциональна квадрату матричного элемента дипольного момента. В литературе существует большое число работ по определению матричного элемента дипольного момента, однако, метод, который используется на данный момент (вариационный) требует много экспериментальной информации, времени, а также необходимость применения различного рода приближений (например, переход от дипольного момента молекулы к эффективному дипольному моменту). С другой стороны, имея аналитический вид параметров эффективного дипольного момента, можно не зная экспериментальной информации о молекуле предсказать значения параметров в разложении эффективного дипольного момента, и таким образом получить значения интенсивности спектральных линий пропуская этап варьирования.

Исходя из вышесказанного, была сформулирована следующая цель: Определение параметров в разложение эффективного дипольного момента в аналитическом виде на примере молекулы SO_2 .

Методы исследования. Точное решение уравнения Шредингера, как известно, возможно только для наиболее простых молекулярных систем (например, молекулярного иона водорода H_2^+). Для решения задачи для более сложных молекул, необходимо использовать теорию возмущения. Гамильтониан системы при этом обычно выбирается в следующем виде [1]: $H(a) = H_0(a) + h(a, b)$, где $H_0(a)$ – оператор, решение уравнения Шредингера с которым известно; $h(a, b)$ – малая добавка к оператору (возмущение) H_0 ; a, b – набор переменных, от которых зависит гамильтониан. Для решения уравнения Шредингера с таким гамильтонианом используют унитарное преобразование, после которого собственные колебательно-вращательные волновые функции гамильтониана меняют на волновые функции эффективного гамильтониана. Задача разбивается на два этапа, что упрощает и делает возможным решение уравнения Шредингера для многоатомных молекул [2]. Подобного рода практика (использования унитарного преобразования для упрощения решения уравнения Шредингера) применима и для успешной реализации цели исследования.

Результаты. В качестве первого шага был построен гамильтониан молекулы типа XY_2 , который без учета гармонического приближения имеет вид: $h = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \mu_{\alpha\beta} (J_\alpha - G_\alpha)(J_\beta - G_\beta)$. Вторым шагом стало использование математического аппарата операторной теории возмущений. Для упрощения решения были использованы свойства симметрии молекулы SO_2 , а также написана специальная программа расчета вращательных параметров гамильтониана.

Таблица 1

Аналитический вид вращательных параметров молекулы типа XY_2

		λ		
		1	2	3
$\sum_{\lambda} \sum_{\alpha\beta} \mu_{\alpha\beta}^{\lambda}$	$\alpha = \beta$ $= x$	$4\sqrt{2} \frac{(B_x^e)^{3/2}}{\omega_1^{1/2}} \cos\gamma$	$4\sqrt{2} \frac{(B_x^e)^{3/2}}{\omega_2^{1/2}} \sin\gamma$	0
	$\alpha = \beta$ $= y$	$4\sqrt{2} \frac{(B_y^e)^2}{\omega_1^{1/2}} \left(\frac{\cos\gamma}{(B_x^e)^{1/2}} + \frac{\sin\gamma}{(B_z^e)^{1/2}} \right)$	$4\sqrt{2} \frac{(B_y^e)^2}{\omega_2^{1/2}} \left(-\frac{\sin\gamma}{(B_x^e)^{1/2}} - \frac{\cos\gamma}{(B_z^e)^{1/2}} \right)$	0
	$\alpha = \beta$ $= z$	$4\sqrt{2} \frac{(B_z^e)^{3/2}}{\omega_1^{1/2}} \sin\gamma$	$-4\sqrt{2} \frac{(B_z^e)^{3/2}}{\omega_2^{1/2}} \cos\gamma$	0
	$\alpha = z,$ $\beta = x$	0	0	$-4\sqrt{2} \frac{(B_z^e)^{1/2} (B_x^e)^{1/2} (B_y^e)^{1/2}}{\omega_3^{1/2}}$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Соколов А. А., Тернов И. М., Жуковский В. Ч. : Квантовая механика. – Издательство. Наука, 1979. – 647 с.
2. Макушкин Ю. С., Улеников О. Н., Чеглоков А. Е.: Симметрия и ее применение к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул. Часть 1. – Томск: Издательство ТГУ, 1990. – 248 с.

**ВЛИЯНИЕ ЛЕГИРОВАНИЯ ВОДОРОДОМ НА СТРУКТУРУ И МИКРОТВЕРДОСТЬ
ВЫСОКОАЗОТИСТОЙ СТАЛИ, ДЕФОРМИРОВАННОЙ МЕТОДОМ КРУЧЕНИЯ ПОД
ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ**

Г.Г. Майер¹, Е.В. Мельников¹, В.А. Москвина^{1,2}

Научный руководитель: доцент, д.ф.-м.н. Е.Г. Астафурова¹

¹ФГБУН Институт физики прочности и материаловедения СО РАН,

Россия, г. Томск, пр. Академический, 2/4, 634055

²Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: galinazg@yandex.ru

**INFLUENCE OF HYDROGEN ALLOYING ON STRUCTURE AND MICROHARDNESS OF HIGH-
NITROGEN STEEL DEFORMED BY HIGH-PRESSURE TORSION**

G.G. Maier¹, E.V. Melnikov¹, V.A. Moskvina^{1,2}

Scientific Supervisor: assistant professor, Dr. E.G. Astafurova¹

¹Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Russia, Tomsk, pr. Akademicheskii, 2/4, 634055

²Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: galinazg@yandex.ru

***Abstract.** The influence of hydrogen alloying on microstructure and microhardness of high-nitrogen Fe-19Cr-21Mn-1.3V-0.8N-0.3C wt. % steel produced by high-pressure torsion (HPT) was investigated. Examination of X-rays diffraction data indicates that hydrogenation of HPT-processed specimens leads to a broadening of X-rays lines and their shifting as result of stacking-faults formation and high residual stresses. Hydrogenation of HPT-processed steel promotes to gamma-epsilon martensitic transformation. Due to hydrogen-induced phase hardening, the microhardness of the steel increases from 6.5 GPa in hydrogen-free state to 6.8 GPa in hydrogen-charged one. After exposure for 170 h. at air condition, the position of X-rays lines became close to one for state after HPT without hydrogen-charging due to release of hydrogen atoms.*

Введение. Проблемы, связанные с присутствием водорода в металлах и сплавах, постоянно находятся в центре внимания широкого круга исследователей. Водород способен оказывать сильное влияние на физико-химические свойства материалов и является, в частности, одной из важнейших причин ухудшения эксплуатационных характеристик сталей. Вопросы взаимодействия водорода с ультрамелкозернистыми структурами, сформированными в сталях методами интенсивной пластической деформации, становится все более актуальными в связи с возрастающей необходимостью снижения массы и повышения прочностных характеристик конструкций и ответственных деталей, работающих в среде водорода [1-4]. Формирование ультрамелкозернистого состояния сопровождается увеличением доли границ зерен, которые выступают местами преимущественного накопления водорода. В результате этого концентрация накопленного водорода в ультрамелкозернистых материалах превышает концентрацию в крупнокристаллических аналогах и возможно усиление эффекта водородной хрупкости. Ввиду ограниченного числа работ по представленной теме, для решения проблемы взаимодействия

водорода с аустенитными сталями с ультрамелкозернистой структурой необходимы детальные исследования их микроструктуры и механических свойств.

Материалы и методика исследования. В качестве объекта исследования была выбрана высокоазотистая аустенитная сталь Fe-19Cr-21Mn-1.3V-0.8N-0.3C (мас.%). Исходное состояние стали получали закалкой в воду после выдержки при $T=1200^{\circ}\text{C}$ в течение 1 часа. После закалки сталь имела структуру преимущественно аустенита (параметр решетки составлял 0,363 нм) с карбонитридами хрома и ванадия. Стальные диски диаметром 10 мм подвергали кручению под давлением (КВД) при комнатной температуре, давлении 6 ГПа, на $N=1$ оборот. После КВД проводили электролитическое насыщение стальных образцов водородом в 3%-ном водном растворе NaCl с добавлением NH_4SCN при комнатной температуре, плотности тока 10 mA/cm^2 и продолжительности наводороживания 15 ч.

Микротвердость стали измеряли на микротвердомере Duramin 5 с нагрузкой $P=200$ г. Среднее значение вычисляли по измерениям, проведенным на середине радиуса дисков. Рентгеновские исследования выполняли на дифрактометре Shimadzu XRD-6000 с использованием Cu K α излучения.

Экспериментальные результаты. КВД стали вызывает уменьшение интенсивности, уширение и смещение рентгеновских линий относительно исходных положений до деформации. Характер рентгенограмм указывает на формирование разориентированной поликристаллической структуры при КВД. После деформации стали на рентгенограммах наблюдали отражения, соответствующие аустениту и карбонитридам (Cr,V)(C,N). Насыщение деформированных образцов водородом сопровождается снижением интенсивности, уширением рентгеновских пиков в сравнении с состоянием после КВД, что свидетельствует о росте внутренних напряжений в структуре стали (рис.1). Обнаруженное смещение рентгеновских линий $(111)_{\gamma}$ в область меньших углов после наводороживания исследуемой стали указывает на рост концентрации дефектов упаковки и увеличение остаточных напряжений (Табл.1) при легировании стали водородом. После наводороживания на рентгенограммах наблюдали линии, межплоскостные расстояния которых соответствуют γ -фазе, карбонитридам ванадия и ϵ -фазе. То есть легирование водородом способствует увеличению доли ϵ -фазы в структуре стали по сравнению с деформированным состоянием.

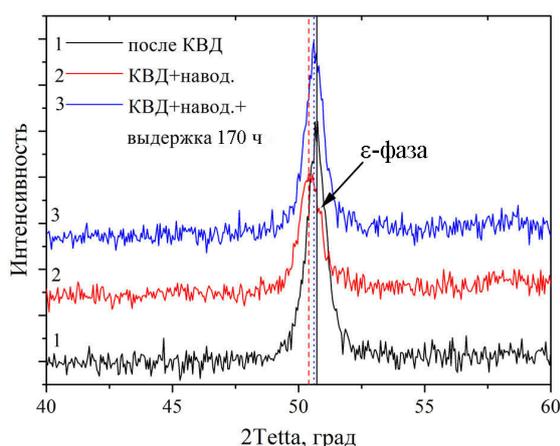


Рис. 1. Фрагменты рентгенограмм исследуемой стали в состоянии: 1) после КВД; 2) после КВД и последующего наводороживания; 3) после КВД, последующего наводороживания и выдержки в течение 170 часов на воздухе

Выдержка на воздухе наводороженных образцов в течение 170 часов сопровождается ростом интенсивности, уменьшением ширины рентгеновских пиков, смещением рентгеновских линий в область больших углов и ростом значений ОКР в сравнении с состоянием после КВД и наводороживания. Это

указывает на частичную релаксацию и $\varepsilon \rightarrow \gamma$ фазовый переход в результате выхода водорода из структуры стали в процессе выдержки образцов на воздухе.

Таблица 1

Влияние КВД и последующего наводороживания на положение (2θ), ширину (FWHM), интенсивность (I) рентгеновских максимумов ($(111)_\gamma$), значения областей когерентного рассеяния (ОКР) и микродеформации кристаллической решетки ($\Delta d/d$)

Состояние	2θ , градусы	FWHM	$I/I_{\text{КВД}}$	ОКР, нм	$\Delta d/d, 10^{-3}$
КВД	50,7078	0,9956	1	20.83	5,0
КВД+наводороживание	50,4586	1,0518	0,48	22.94	6,6
КВД+наводороживание+ выдержка в течении 170 ч	50,6638	1,0049	0,51	47.54	6,7

После КВД сталь обладает высокими значениями микротвердости – 6.5 ГПа, распределение микротвердости по диаметру дисков после КВД квазиоднородное. Наводороживание деформированных образцов приводит к повышению значений микротвердости до 6.8 ГПа, а последующая выдержка на воздухе сопровождается спадом значений до 6.4 ГПа. Связанное с легированием водородом повышение микротвердости образцов обусловлено фазовым наклепом за счет реализации $\gamma \rightarrow \varepsilon$ мартенситного превращения, а также ростом внутренних напряжений. Понижение микротвердости после выдержки в образцах связано с обратным $\varepsilon \rightarrow \gamma$ превращением и релаксацией напряжений из-за выхода водорода.

Заключение. Электролитическое насыщение водородом высокоазотистой аустенитной стали Fe-19Cr-21Mn-1.3V-0.8N-0.3C (мас.%) в ультрамелкозернистом состоянии, полученном методом кручения под высоким давлением, приводит к уширению, уменьшению интенсивности и смещению рентгеновских линий $(111)_\gamma$ в область меньших углов, а также появлению отражений от ε -фазы. После наводороживания происходит увеличение микротвердости стали, связанное с индуцированным водородом фазовым наклепом и увеличением внутренних напряжений. Связанные с наводороживанием эффекты упрочнения исчезают после выдержки наводороженных образцов на воздухе.

Работа выполнена при поддержке стипендии Президента РФ (СП-160.2016.1).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Mine Y., Tsumagaria T., Horita Z. Hydrogen trapping on lattice defects produced by high-pressure torsion in Fe-0.01 mass% C alloy // Scripta Materialia – 2010 – V.63 – pp.552–555.
2. Mine Y., Horita N., Horita Z., Takashima K. Effect of ultrafine grain refinement on hydrogen embrittlement of metastable austenitic stainless steel // International journal of hydrogen energy–2017–V.42 – pp. 15415-15425.
3. Nie Y., Kimura Y., Inoue T., Yin F., Akiyama E., Tsuzaki K. Hydrogen Embrittlement of a 1500-MPa Tensile Strength Level Steel with an Ultrafine Elongated Grain Structure // Metallurgical and Materials Transactions A – 2012 – V. 43a – pp.1670-1687.
4. Tsay L.W., Lu H.L., Chen C. The effect of grain size and aging on hydrogen embrittlement of a maraging steel // Corrosion Science – 2008 – V.50 – pp.2506–2511.

**ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ МИКРОСТРУКТУРЫ ТИТАНОВЫХ ИЗДЕЛИЙ,
ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДАМИ АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ**

С.А. Мартынов, А.Н. Русяев

Научный руководитель: м.н.с., к. ф.-м. н. С.А. Мартынов

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН

634055, г. Томск, просп. Академический, 2/4

E-mail: martynov@ispms.tsc.ru

**INVESTIGATION IN THE MICROSTRUCTURE FORMATION OF TITANIUM PRODUCTS
OBTAINED BY ADDITIVE MANUFACTURING**

S.A. Martynov, A.N. Rusyayev

Scientific Supervisor: Dr. S.A. Martynov

Institute of Strength Physics and Materials Science of the SB RAS

Russia, Tomsk, 2/4, pr. Akademicheskii, 634055,

E-mail: martynov@ispms.tsc.ru

Abstract. The regularities in the microstructure and phase composition of the 3D printed commercially pure titanium and Ti-6Al-4V titanium alloy specimens are studied using optical and transmission electron microscopes as well as X-ray diffractometer.

Введение. В настоящее время наблюдается громадный интерес к исследованию и разработке аддитивных технологий, среди которых наиболее актуальным является металлическое направление — производство деталей для сложных узлов авиакосмической, транспортной и оборонной техники [1]. В отличие от традиционных методов получения конструкционных материалов, в процессе 3D-печати, как правило, формируется неоднородная микроструктура, обусловленная комплексным влиянием процессов быстрой кристаллизации, направленного охлаждения и фазовых переходов, вызванных повторяющимися термическими циклами (при нанесении последующих слоев каждый сформировавшийся слой еще до трех раз испытывает переход из твердого состояния в жидкое и обратно). В частности, в различных областях 3D-напечатанных титановых изделий могут формироваться квазиравноосные зерна или видманштеттова структура, выделяться α' - или ω -фазы, интерметаллидные частицы и др. В связи с вышесказанным целью данной работы является исследование закономерностей формирования микроструктуры 3D-напечатанных образцов титана ВТ1-0 и ВТ6, полученных методом электронно-лучевого сплавления.

Материалы и методы исследования. В настоящей работе исследовали образцы из технического титана ВТ1-0 и титанового сплава ВТ6, полученные прокаткой, а также полученные методом электронно-лучевой плавления соответствующих порошков на установке 6E400, оснащенной электронной пушкой с плазменным катодом и манипулятором, перемещающимся в трех взаимноперпендикулярных плоскостях. Морфологию поверхности и микроструктуру образцов исследовали с помощью оптического микроскопа Zeiss Axiovert 25. Дефектную субструктуру исследуемых образцов определяли методами дифракционной электронной микроскопии тонких фольг на просвечивающем электронном микроскопе JEOL JEM-2100.

Идентификация фаз проводилась с применением темнопольной методики. Фазовый состав образцов изучали методами рентгеноструктурного анализа (РСА) на дифрактометре Shimadzu XRD-7000S в $\text{Cu } K_{\alpha}$ -излучении. Измерение микротвердости исследуемых образцов выполняли на микротвердомере ПМТ-3 с использованием пирамидки Виккерса (нагрузка составляла 50 г).

Экспериментальные результаты и их обсуждение. В отличие от равноосных зерен, формирующихся в прокатанных образцах ВТ1-0, напечатанные изделия, полученные путем электронно-лучевого плавления порошка технического титана ВТ1-0, характеризуются зернами со средним размером 800-1000 мкм, имеющими мартенситную структуру (рис. 1). Наличие последней связано с тем, что в процессе быстрой кристаллизации наплавленного слоя (скорость остывания достигает 10^4 К/с [1]) в условиях высоких градиентов температуры, а также сильного искажения кристаллической решетки первоначально образованные зерна β -фазы испытывают $\beta \rightarrow \alpha'$ превращение по бездиффузионному мартенситному механизму с образованием пластинчатой α' -фазы. Мартенситные пластины ориентированы в различных направлениях и их поперечный размер достигает 5-10 мкм. Наличие мартенситной структуры обуславливает высокую микротвердость напечатанных изделий из технического титана ВТ1-0 (3700 МПа), что существенно превышает микротвердость прокатанных образцов (1600 МПа). Поскольку α' -фаза титана не выявляется методом рентгеноструктурного анализа, то рентгенограммы образцов ВТ1-0, находящегося в состоянии прокатки и полученного методом 3D-печати отличаются лишь преимущественной ориентацией структуры в направлении (002) (рис. 2).

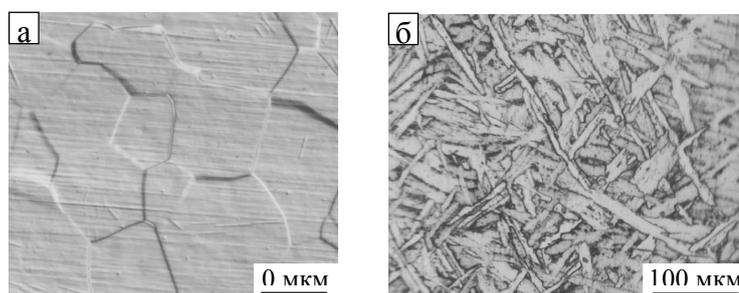


Рис. 1. Микроструктура образцов технического титана ВТ1-0, находящихся в состоянии поставки (а) и полученного методом электронно-лучевого плавления (б)

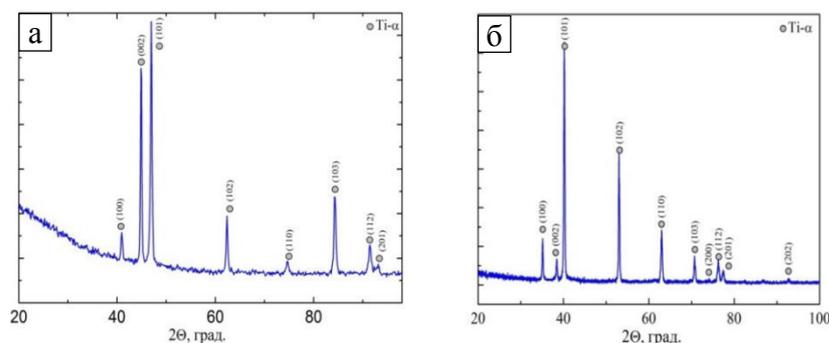


Рис. 2. Рентгенограммы образцов технического титана ВТ1-0, находящихся в состоянии поставки (а) и полученного методом электронно-лучевого плавления (б)

Структура 3D-напечатанных титановых образцов из титанового сплава ВТ6 характеризуется наличием крупных (средний размер ~ 200 мкм) зерен, состоящих из пластин α -Ti и прослоек β -Ti (рис. 3). Подобная структура характерна для листового сплава ВТ6, подвергнутого закалке от 960°C в воду и старению при 550°C в течение 4 часов. По данным рентгеноструктурного анализа объемная доля β -фазы в 3D-напечатанных образцах ВТ6 не превышает 3%, что оказывается существенно меньше по сравнению с титановым сплавом ВТ6, полученным традиционными технологиями (рис. 4). При этом микротвердость напечатанных образцов ВТ6 составляет 4400 МПа, что превышает твердость закаленных и состаренных образцов (3600 МПа).

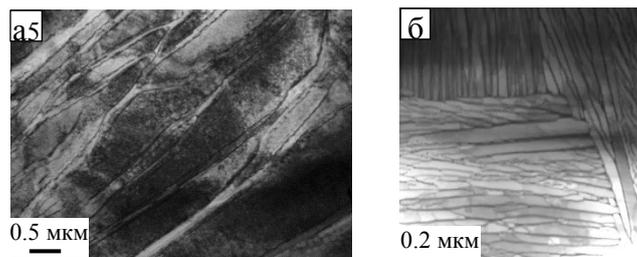


Рис. 3. ПЭМ-изображения структуры образцов титанового сплава ВТ6, находящихся в состоянии поставки (а) и полученного методом электронно-лучевого плавления (б)

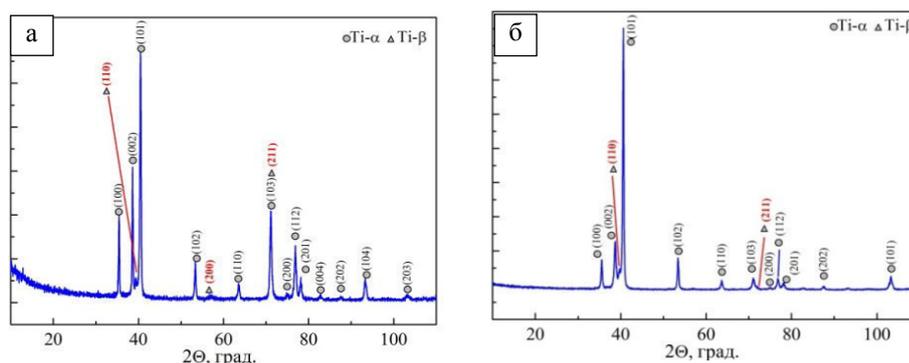


Рис. 4. Рентгенограммы образцов титанового сплава ВТ6, находящихся в состоянии поставки (а) и полученного методом электронно-лучевого плавления (б)

Выводы. Отработана технология получения объемных изделий из титана ВТ1-0 и сплава ВТ6 методом электронно-лучевого сплавления порошка. Показано, что вследствие высокой скорости охлаждения наплавленного слоя в образцах технического титана ВТ1-0 формируются зерна со средним размером 800-1000 мкм, состоящие из пластинчатой α' -фазы. Микротвердость напечатанного образца составляет 3200 МПа, что значительно больше, чем у образца в состоянии поставки.

В процессе плавления порошка из титанового сплава ВТ6 микроструктура образцов представляет собой крупные зерна со средними размерами 200 мкм, состоящие из пластин α -Ti и прослоек β -Ti. По сравнению с образцами ВТ6, находящимися в состоянии поставки, 3D-напечатанные образцы характеризуются более высокой твердостью, достигающей 4400 МПа.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зленко М.А. Аддитивные технологии в машиностроении / М.В. Нагайцев, В.М. Довбыш // пособие для инженеров. – М. ГНЦ РФ ФГУП «НАМИ» 2015. 220 с.

**СЦИНТИЛЛЯЦИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЛЮМИНОФОРОВ
НА ОСНОВЕ ФТОРИДОВ МЕТАЛЛОВ**

Л. С. Матецкая, Л. А. Лисицына

Научный руководитель: проф. доктор физ.-мат. наук Л.А. Лисицына Томский государственный
архитектурно-строительный университет Россия, Томск, пл. Соляная 2, 634003

E-mail: lysinda_m@mail.ru

SCINTILLATION CHARACTERISTICS OF LUMINOPHORES ON BASIS OF METAL FLUORIDES

L. S. Matetskaya, L. A. Lisitsyna

Scientific Supervisor: Prof., Dr. L. A. Lisitsyna

Tomsk State University of Architecture and Building Russia, Tomsk, Solijnaji sq. 2, 634003

E-mail: lysinda_m@mail.ru

***Abstract.** The results of a comparative analysis of photo-and cathodoluminescence of pre-irradiated by an electron beam LiF-MeO phosphors are given and interpreted within the framework of the proposed model.*

Введение. Расширение области применения люминофоров в народном хозяйстве со всей очевидностью свидетельствует об актуальности исследования влияния условий эксплуатации на эмиссионные характеристики люминофоров. К основным требованиям, предъявляемым к люминофорам, помимо высокой конверсионной эффективности, термостойкости, влагостойкости и высокой механической прочности, относятся также химической инертность и высокая радиационная стойкость.

В настоящей работе методами оптической спектрометрии рассмотрена возможность оценки процессов старения в поле ионизирующей радиации, как в объеме, так и на поверхности люминофоров.

Объект и метод исследования. Исследовались люминофоры на основе фторида лития, активированного окислами металлов (Me: W, Ti, или Li). Спектры поглощения (СП) кристаллов LiF-MeO состоят из полос поглощения на 6.2, 7.3, 9 и 10.5 эВ (рис.1), положение которых не зависит от типа окисла, а интенсивность увеличивается с ростом его концентрации. Являясь преобразователями высокоэнергетического излучения в излучение видимого диапазона, кристаллы LiF-MeO обладают высоким световыходом и коротким характеристическим временем затухания свечения в рабочей полосе, величина которого при 300 К равна 40, 120 или 400 мкс в кристаллах LiF, активированных окислами WO₃, TiO₂ или Li₂O, соответственно.

Импульсная катодолуминесценция (КЛ) и импульсная фотолуминесценция (ФЛ) люминофоров LiF-MeO исследовались в спектральном диапазоне 5–1 эВ. Предварительное облучение люминофоров при 300 К осуществлялось на импульсном ускорителе электронов с характеристиками: длительность импульса 10 нс, средняя энергия электронов 250 кэВ ($\gg E_g$), частота следования импульсов $5 \cdot 10^{-2}$ Гц. Диапазон поглощенных люминофором доз 0–10⁵ Гр.

КЛ возбуждалась импульсом электронов. ФЛ возбуждалась импульсом лазерного излучения с энергией кванта 4.66 эВ, длительностью 5 нс и энергией в импульсе 40 мДж.

Результаты исследований и обсуждение. Матрица люминофоров (кристалл LiF) представляет собой нелюминесцирующий широкозонный диэлектрик ($E_g=13.6$ эВ) прозрачный в VUV области.

Спектры КЛ и ФЛ не облученных люминофоров LiF-MeO содержат слабую короткоживущую (20 нс) полосу на 3 эВ неизвестной природы и рабочую полосу, положение максимума которой на 2.65, 2.8 и 3 эВ наблюдается в кристаллах LiF, содержащих катионы-активаторы W^{6+} , Ti^{4+} или Li^{1+} соответственно. Центр свечения (ЦС) рабочей полосы люминофоров состоит из поливалентного катион-активатора, координированного ионами кислорода O^{2-} , число которых определяется зарядовым состоянием активатора и типом дефектов решетки (анионных (V_a) или катионных вакансий (V_c)) в составе ЦС.

Воздействие потока электронов приводит к созданию и накоплению в матрице люминофора центров окраски (ЦО), в частности, F_1 , F_2 и F_3^+ , представляющих собой электрон, локализованный на анионной вакансии (F_1), два электрона в поле двух анионных вакансий (F_2) или в поле трех анионных вакансий (F_3^+). Присутствие ЦО, как показано в [1], приводит к реабсорбции активаторного свечения самой матрицей, и как следствие, к деградации световыхода – основного параметра люминофора.

Как установлено нами, другим результатом радиационного образования ЦО является потеря люминофором прозрачности в UV области спектра из-за присутствия полос поглощения, в частности, полосы на 5,0 эВ (рис.1), принадлежащей F_1 и F_2 ЦО, интенсивность которой растет с увеличением поглощенной дозы. Таким образом, величина коэффициента поглощения k в спектральной области 4–6 эВ исследуемых люминофоров определяется двумя параметрами: концентрацией исходной и радиационной дефектности материала (рис.1, кривые 3 и 4).

В настоящей работе эмиссия люминофоров возбуждалась двумя способами: импульсом электронов, глубина проникновения которых в LiF равна 250 мкм, и импульсом лазерного излучения с энергией кванта 4.66 эВ, глубина проникновения которого в люминофор зависит от дефектности материала. В соответствии с законом Бугера-Ламберта, характеристическая глубина проникновения $d(\lambda)$ монохроматического света в материал равна $d(\lambda) = k^{-1}(\lambda)$, где $k(\lambda)$ - коэффициент поглощения на длине волны λ . В исследуемых нами материалах величина $k(\lambda)$ на длине волны лазерного излучения 266 нм принимала значения в диапазоне $1-100 \text{ см}^{-1}$ в зависимости от концентрации вводимого окисла и величины поглощенной люминофором дозы, а величина $d(\lambda)$ изменялась в диапазоне 1-0.01 см. Таким образом, в одном и том же люминофоре спектр КЛ отражает свойства ЦС в объеме люминофора, а спектр ФЛ, в зависимости от величины $k(\lambda)$ - свойства ЦС в приповерхностном слое люминофора $d(\lambda)$.

Описанный эффект проявляется в существовании зависимости эмиссионных свойств люминофора от способа возбуждения эмиссии. Во-первых, в одном и том же люминофоре скорость падения световыхода в рабочей полосе люминофора с ростом поглощенной дозы по данным ФЛ и КЛ не совпадают (рис.1, вставка). Во-вторых, одновременно с падением интенсивности рабочей полосы люминофора интенсивность короткоживущей полосы на 3 эВ в спектрах ФЛ увеличивается с ростом дозы, а по данным КЛ - остается неизменной (рис.1, вставка).

В рамках вышеизложенной модели полученные результаты имеют следующее объяснение.

1) Совпадение спектров КЛ и ФЛ свидетельствует об отсутствии градиента концентрации рабочих центров по глубине люминофора.

2) С ростом дозы различие в скорости деградации световыхода, измеряемое по спектрам ФЛ и КЛ, обусловлено специфическим радиационным изменением свойств поверхности по сравнению с объемом кристалла. Эффект удается фиксировать, благодаря малой глубине проникновения лазерного излучения в облученный люминофор.

3) Отсутствие дозовой зависимости интенсивности эмиссии в полосе на 3 эВ в спектре КЛ говорит о малой доле соответствующих ЦС в объеме возбуждаемого импульсом электронов материала.

4) Наблюдаемое в спектрах ФЛ одновременное падение световыхода в рабочей полосе и увеличение интенсивности полосы на 3 эВ прямо свидетельствует о разрушении рабочих ЦС и создании под действием облучения новых ЦС в приповерхностной области люминофора. Предположительно эмиссия на 3 эВ принадлежит комплексу ($O^{2-}-V_a$), в пользу чего свидетельствуют: содержание кислорода на поверхности облученного кристалла LiF по данным [2], а также появление короткоживущей эмиссии на 3 эВ в результате длительной термической обработки люминофора.

Выводы. 1) В представленной работе дано обоснование возможности использования ФЛ, как одного из методов оптической спектрометрии, для оценки изменения состояния поверхности люминофоров на основе LiF. 2) По результатам сопоставительного анализа спектров ФЛ и КЛ предварительно облученных электронами люминофоров установлено, что одной из причин радиационного падения световыхода является разрушение в приповерхностной области люминофора рабочих ЦС и создание новых ЦС с излучательным переходом на 3 эВ.

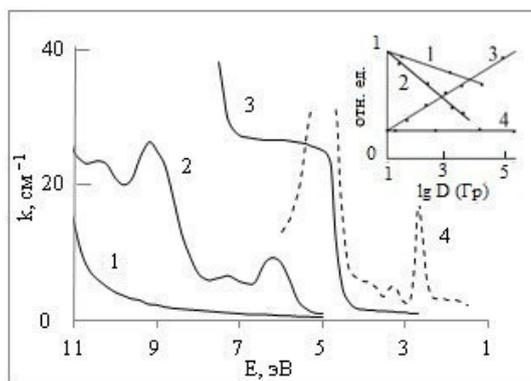


Рис.1. СП кристаллов LiF-WO₃ до облучения (1–3) и после облучения электронами ($D=10^3$ Гр) (4) с содержанием вольфрама: 1 - 0; 2 - 0.01; 3, 4 - 0.3 масс. %. На вставке: дозовая зависимость амплитуды рабочей полосы (1, 2) и полосы на 3 эВ (3, 4) в кристалле LiF-TiO₂ по данным КЛ (1, 4) и ФЛ (2, 3).

Начальные значения амплитуд нормированы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lisitsyna L. A., Suleimen R. N. Degradation of emission parameters in LiF-MeO crystal scintillators // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. 168 (2017) 012100 doi:10.1088/1757-899X/168/1/012100.
2. Sarantopoulou E., Varsamis C. P., Kollia Z., Cefalas A. C., Kovac̆ J., Kobe S. VUV light induced surface interaction and accelerated diffusion of carbon, silicon, oxygen and other contaminants in LiF crystals. // Applied Surface Science. – 2007. – V. 254. – P. 804–810.

РАСЧЕТ ТЕМПЕРАТУРЫ В ТВЭЛЕ ИЗ КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА КМ

О. Мендоса

Научный руководитель: заведующий каф. ТФ, д.ф.-м.н. И.В. Шаманин
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050
E-mail: kiros@tpu.ru

TEMPERATURE DISTRIBUTION IN MIXED NUCLEAR FUEL OF COMPOSITE MATERIAL CM

O. Mendoza

Scientific Supervisor: Prof., Dr. I.V. Shamanin
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050
E-mail: kiros@tpu.ru

***Abstract.** Article represents the theoretical determination of the temperature distribution in mixed nuclear fuel, through mathematical models the thermal conductivity of the composite fuel is calculated, and with it through the heat transfer equation the distribution is determined by the temperature in the fuel.*

Введение. При эксплуатации энергетического ядерного реактора одной из основных характеристик, определяющей его безаварийную работу, является максимальная температура топлива, достигаемая при использовании композиционного материала. Высокая температура сокращает срок службы топлива и является одной из причин для изучения композитных материалов топлива реакторов.

Дисперсионным ядерным топливом называется композиционный материал, в котором делящийся материал (^{233}U , ^{235}U и ^{239}Pu) находится в форме включения в матрицу из материала с высоким коэффициентом теплопроводности и низким поглощением нейтронов.

Основным требованием к композиционным материалам ТВЭЛов является совместимость всех материалов при максимально возможных рабочих температурах, возникающих в ТВЭЛах в процессе их изготовления. Под совместимостью подразумевается такая комбинация свойств, которая позволяет материалам ТВЭЛа находиться в контакте друг другом, не вступая в химическое или металлургическое взаимодействие. Совместимость выбранных материалов определяет по существу предельную рабочую температуру ТВЭЛа.

Используемые методы и модели. Для расчета распределение температура в ТВЭЛЕ первый шаг, нужно найти коэффициент теплопроводности элементарной ячейки композиционного материала с вкраплениями λ , который зависит от размера блоков 1 (матрицы) $L = 100$ мкм, и 2(включения) $l = 90$ мкм (рис.1б), от коэффициента теплопроводности λ_1 материала блока 1 (BeO), коэффициента теплопроводности λ_2 материала блока 2 (UO_2). Расчет коэффициентов теплопроводности произведен в среде Visual Basic, которая позволяет автоматизировать расчеты, [1].

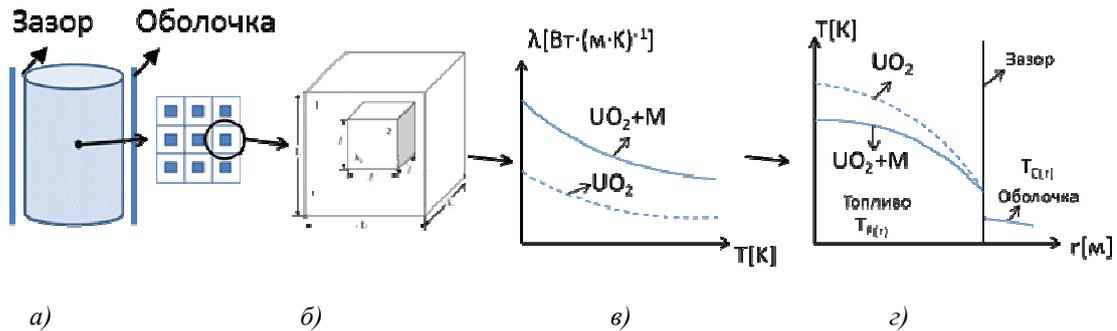


Рис. 1. Модель композитного топлива (а), элементарная ячейка (б), коэффициент теплопроводность (в), распределения температура (г)

Второй шаг: Определение теплового потока, используя уравнение теплопередачи [2] (1)

$$\lambda \cdot \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \cdot \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] + q_v = \rho \cdot C_p \cdot \frac{\partial T}{\partial t} \quad (1)$$

Тепловыделяющий элемент содержит топливные таблетки, зазор между таблеткой и оболочку ТВЭЛа (рис. 1а),

Максимальное значение температуры приходится на центральную линию топлива, её распределение носит убывающий характер от оси до внешнего радиуса топливной таблетки. Геометрические размеры топливной таблетки, теплопроводность материалов (матрицы, делящегося материала, стенки тепловыделяющего элемента) известны т.к. являются справочными величинами, далее мы рассмотрим термический анализ топливного элемента ВВЭР. Выясним это, решением классического уравнения теплопроводности

Беря примером реактор ВВЭР мы изменяем только состав самой таблетки включенной в ТВЭЛ, добавляя композиционные материалы, и изучая уже на основе имеющихся данных поведение новых материалов в известных нам условиях.

Основные предположения: на этом осевой передачей тепла пренебрегают, поскольку длина стержня намного больше его диаметра. А также потому, что торцы таблеток не соприкасаются, обеспечивая высокую теплопроводность таблетки $\partial T / \partial Z = 0$, $\partial T / \partial t = 0$. Уравнение теплопроводности, по направлению оси $\partial T / \partial \theta$ [3] тепловыделяющий элемент, этими данными мы можем пренебречь.

Сопоставление результатов. Анализ результатов коэффициентов теплопроводности для таблеток композиционного материала BeO-UO₂, полученных в среде Visual Basic [1] показал, что модель обобщенной проводимости Лихтенеккера для смесей с неравноправными компонентами при перпендикулярной ориентации пластин (ЛихтеПЕР) и модель обобщенной проводимости Лихтенеккера для смесей с равноправными (форма включения – квадрат) компонентами (Лихте 2) наиболее точно описывают экспериментальные данные (Рисунок 2а).

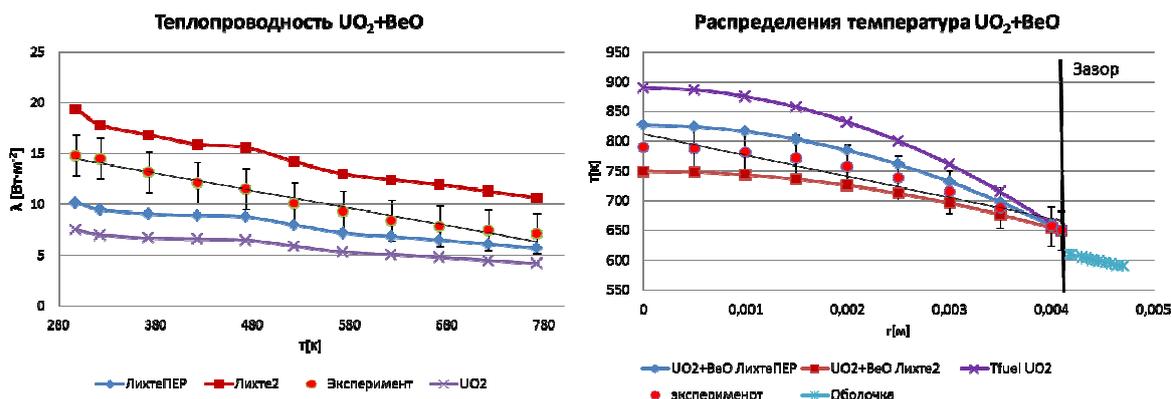


Рис. 2. коэффициент теплопроводность (а), распределения температура (б)
матрица – BeO, включения –UO₂

При использовании функций (1) с предположением, определенных из аналитической функции, получены значения, аналогичные экспериментальным данным. Определено, максимальная температура в центре таблетки (на оси) композиционного материала BeO-UO₂ ниже, чем у однородного UO₂.

Хотя две модели (ЛихтеПЕР и Лихте 2) близки к экспериментальным значениям композиционного материала BeO-UO₂, для расчета распределения тепла выбирается модель теплопроводности ЛихтеПЕР с температурой 523K (Рисунок 2а), которая расположена ниже экспериментальных значений. Причиной этого является то, что при использовании этой модели ЛихтеПЕР, распределение температуры будет больше, чем экспериментальное. Это позволяет включить адекватный коэффициент безопасности, когда рассчитываем и определяем характеристики реактора

На графике рисунка 2б, мы можем видеть модель ЛихтеПЕР, значение, соответствующее распределению тепла в композите, имеет ΔT~ 40К. При использовании программы [1] полученные результаты аналогичны полученным экспериментальным данным.

Заключение. В этой работе был предложен метод решения проблем теплопроводности в составном топливном элементе, была найдена модель, позволяющая точно предсказать теплопроводность композиционных материалов. Решая одномерную радиальную проводимость в цилиндрических координатах для устойчивого состояния, для оценки точности и эффективности, найдено, что теоретические и экспериментальные данные аналогичны, обнаруживаем, что в центре гранулы, где температура выше, разница между теоретической и экспериментальной в ΔT~ 40К

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Мендоса О., Каренгин А. Г., Новоселов И. Ю., Шаманин И. В., Определение теплофизических свойств композиционного материала с использованием различных моделей // *Фундаментальные Проблемы Современного Материаловедения*, том 14 №2 (2017) С. 178 -183,
2. Todreas. N., Kazimi M., *Nuclear Systems I, Thermal Hydraulic Fundamentals*. Taylor & Francis, 1993.– pag 705.
3. Алексеев С. В., Зайцев В.А. *Дисперсионное ядерное топливо* // Москва: ТЕХНОСФЕРА, 2015.– 248с.

**АНАЛИЗ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ
ПОЛОСЫ ν_{10} МОЛЕКУЛЫ C_2D_4 В ДИАПАЗОНЕ 450-750 CM^{-1}**

М.А. Меркулова

Научный руководитель: профессор, д. ф.-м. н. Е.С. Бехтерева
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050
E-mail: mam36@tpu.ru

**ANALYSIS OF HIGH-RESOLUTION SPECTRA OF THE ν_{10} BAND OF C_2D_4 MOLECULE
IN 450-750 CM^{-1} RANGE**

M.A. Merkulova

Scientific Supervisor: Prof., Dr. E. S. Bekhtereva
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050
E-mail: mam36@tpu.ru

***Abstract.** For the first time, high-accurate Fourier-transform infrared spectra of the C_2D_4 molecule were recorded and analyzed in the region of 450-750 cm^{-1} where P-branch of the ν_{10} band is located.*

Введение. Молекула этилена является одним из наиболее распространенных объектов в природе и, следовательно, интенсивно исследовалась в лабораторных условиях. Вместе с тем, для многих как чисто академических, так и прикладных задач, возникает необходимость иметь информацию не только об основном изотопологе, C_2H_4 , но и о других его модификациях. Большая часть изотопических модификаций молекулы этилена ранее не исследовалась или была исследована недостаточно, для некоторых из них объектами изучения были только некоторые сильные фундаментальные полосы [1].

Анализ спектров позволяет определить систему уровней энергии молекулы, найти спектроскопические параметры, из которых могут быть определены структурные характеристики и др. Определив уровни энергии, можно получить точные значения межатомных расстояний, частот колебаний и силовых параметров, энергий диссоциации и других величин, характеризующих многоатомную молекулу [2]. В связи с вышесказанным, целью работы является анализ колебательно-вращательного спектра высокого разрешения полосы ν_{10} молекулы этилена C_2D_4 .

Краткие сведения о молекуле C_2D_4 . Равновесная конфигурация молекулы представлена на рисунке 1, где угол между связями $\alpha = 121^\circ$. Этилен, C_2D_4 , это молекула типа ассиметричного волчка, группа симметрии данной молекулы изоморфна точечной группе симметрии D_{2h} . Центр исследуемой полосы ν_{10} составляет 597,99023 cm^{-1} .

Для того чтобы описать состояние квантовой системы данной молекулы, необходимо знать решение уравнения Шредингера. Знание решений позволяет провести всестороннее исследование молекулы как квантового объекта. Собственные значения гамильтониана, получающиеся из решения уравнения Шредингера, это не что иное, как возможные энергии, которыми может обладать квантовая система. Определение собственных значений гамильтониана заключается в построении его матрицы на полном ортогональном наборе функций с последующей диагонализацией. Знание собственных функций

позволяет определить вероятность переходов, рассчитать средние значения физических величин, характеризующих молекулу и т.д.

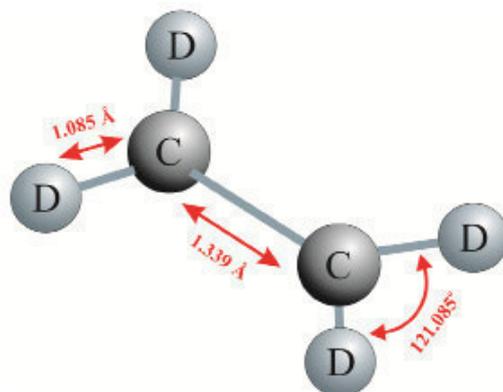


Рис. 1. Равновесная конфигурация молекулы

При решении электронно-колебательно-вращательного уравнения Шредингера для многоатомной молекулы применяют приближенный метод построения так называемого эффективного гамильтониана. Теоретический анализ полосы должен быть выполнен с помощью модели данного гамильтониана, которая учитывает резонансные взаимодействия между колебательными состояниями [3]. Таким образом, диагональные блоки гамильтониана представляются в виде (1) [4].

$$\begin{aligned}
 H^{v\tilde{v}} = & E^v + \left[A^v - \frac{1}{2}(B^v + C^v) \right] J_z^2 + \frac{1}{2}(B^v + C^v) J^2 + \frac{1}{2}(B^v + C^v) J_{xy}^2 \\
 & - \Delta_K^v J_z^4 - \Delta_{JK}^v J_z^2 J^2 - \Delta_K^v J^2 - \delta_K^v [J_z^2, J_{xy}^2]_+ - 2\delta_J^v J^2 J_{xy}^2 + H_K^v J_z^6 + \\
 & H_{KJ}^v J_z^4 J^2 + H_{JK}^v J_z^2 J^4 + H_J^v J^6 + \left[h_K^v J_z^4 + h_{JK}^v J_z^2 J^2 + h_J^v J^4, J_{xy}^2 \right]_+ + \\
 & L_K^v J_z^8 + L_{KKJ}^v J_z^6 J^2 + L_{JK}^v J_z^4 J^4 + L_{JK}^v J_z^2 J^6 + L_J^v J_z^8 + \\
 & \left[J_K^v J_z^6 + J_{KJ}^v J_z^4 J^2 + J_{JK}^v J_z^2 J^4 + J_J^v J^6, J_{xy}^2 \right]_+ + P_K^v J_z^{10} + P_{KKJ}^v J_z^8 J^2 + P_{KJ}^v J_z^6 J^4 \\
 & + P_{JK}^v J_z^4 J^6 + S_K^v J_z^{12} + S_{KKJ}^v J_z^{10} J^2 + \dots,
 \end{aligned} \quad (1)$$

Что касается недиагональных блоков, то исходя из соображений симметрии, можно показать, что три оператора, описывающие Кориолисово взаимодействие (резонанс между состояниями разной симметрии), должны быть записаны в следующей форме:

$$\begin{aligned}
 H_{v,\tilde{v}} (v \neq \tilde{v}) = & v\tilde{v} F_0 + v\tilde{v} F_K J_z^2 + v\tilde{v} F_J J^2 + \dots + v\tilde{v} F_{xy} (J_x^2 - J_y^2) \\
 & + v\tilde{v} F_{Kxy} \{ J_z^2, (J_x^2 - J_y^2) \}_+ + 2 v\tilde{v} F_{Jxy} J^2 (J_x^2 - J_y^2) + \dots
 \end{aligned} \quad (2)$$

1. *A* – тип Кориолиса между состояниями ($v_{10} = 1, B_{2u}$) и ($v_7 = 1, B_{1u}$)

$$\begin{aligned}
 H_{v,\tilde{v}} = & iJ_z H_{v\tilde{v}}^{(1)} + [J_x, J_y] H_{v\tilde{v}}^{(2)} + H_{v\tilde{v}}^{(2)} [J_x, J_y] \\
 & + [iJ_z, (J_x^2 - J_y^2)] H_{v\tilde{v}}^{(3)} + H_{v\tilde{v}}^{(3)} [iJ_z, (J_x^2 - J_y^2)] + \dots,
 \end{aligned} \quad (3)$$

2. *B* – тип Кориолиса между состояниями ($v_{10} = 1, B_u$) и ($v_4 = 1, A_u$):

$$H_{v,\tilde{\nu}} = iJ_x H_{v\tilde{\nu}}^{(1)} + H_{v\tilde{\nu}}^{(1)} iJ_y + [J_y, J_z] H_{v\tilde{\nu}}^{(2)} + H_{v\tilde{\nu}}^{(2)} [J_y, J_z] + [iJ_x, (J_x^2 - J_y^2)] H_{v\tilde{\nu}}^{(3)} + H_{v\tilde{\nu}}^{(3)} [iJ_x, (J_x^2 - J_y^2)] + \dots, \quad (4)$$

3. C – тип Кориолиса между состояниями ($\nu_{10} = 1, B_{2u}$) и ($\nu_{12} = 1, B_{3u}$):

$$H_{v,\tilde{\nu}} = iJ_y H_{v\tilde{\nu}}^{(1)} + H_{v\tilde{\nu}}^{(1)} iJ_x + [J_x, J_z] H_{v\tilde{\nu}}^{(2)} + H_{v\tilde{\nu}}^{(2)} [J_x, J_z] + [iJ_y, (J_x^2 - J_y^2)] H_{v\tilde{\nu}}^{(3)} + H_{v\tilde{\nu}}^{(3)} [iJ_y, (J_x^2 - J_y^2)] + \dots, \quad (5)$$

В нашей работе был зарегистрирован и проанализирован высокоточный Фурье-спектр молекулы C_2D_4 . Спектр был зарегистрирован на инфракрасном спектрометре Bruker IFS 120. Спектр был записан при следующих экспериментальных условиях: давление образца – 800 Па; оптическая длина пути – 16 м; количество сканирований – 80 (рис. 2).

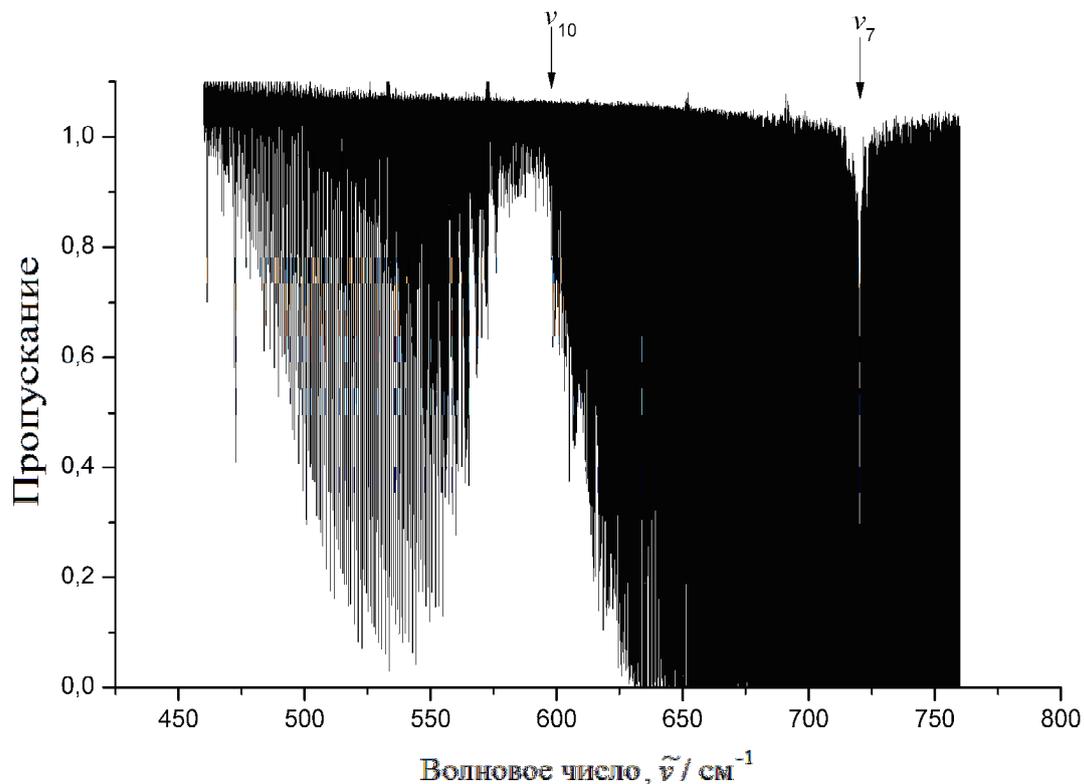


Рис. 2. Спектр молекулы C_2D_4 в диапазоне 350-800 $см^{-1}$

Результаты анализа спектра. Исследуемая полоса ν_{10} является полосой B – типа и имеет следующие правила отбора: $\Delta J = 0, \pm 1$ и $\Delta K_a = \pm 1, \Delta K_c = \pm 1$. Информация об энергетических уровнях основного колебательного состояния была получена из работы [5]. В результате работы был проинтерпретирован спектр молекулы C_2D_4 в районе P-ветки полосы ν_{10} . Максимальное значение квантового числа $J = 40$ и максимальное значение квантового числа $K_a = 23$. Для анализа экспериментальных данных была использована модель эффективного оператора в виде (1) - (5). В качестве иллюстрации часть найденных переходов представлена в таблице 1.

Таблица 1

Электронные переходы в молекуле этилена

Верхние J K _a K _c	Нижние J' K' _a ' K' _c '	Положение линии, см ⁻¹	Пропускание, %	Верхний эн-ий уровень, см ⁻¹
6 6 1	7 7 0	560.02991	27.6	684.16617
7 6 2	8 7 1	558.62784	31.5	693.18602
8 6 3	9 7 2	557.21147	33.2	703.50038
9 6 4	10 7 3	555.78107	34.5	715.11168
10 6 5	11 5 6	597.08020	98.3	728.02309
11 6 6	12 7 5	552.87949	38.3	742.23624
12 6 7	13 7 6	551.40918	40.8	757.75593
	13 5 8	593.96500	95.5	757.75648
13 6 8	14 7 7	549.92634	42.4	774.58518
	14 5 9	592.34228	95.1	774.58569
14 6 9	15 7 8	548.43121	67.3	792.72772
	15 5 10	590.66393	96.3	792.72845
15 6 10	16 7 9	546.92475	71.8	812.18831
	16 5 11	588.91648	97.1	812.18893
16 6 11	17 7 10	545.40674	74.9	832.97090
	17 5 12	587.08214	97.2	832.97149
17 6 12	18 7 11	543.87707	76.4	855.08001
	18 5 13	585.13905	98.3	855.08074
18 6 13	19 7 12	542.33485	77.9	878.51995
19 6 14	20 7 13	540.77803	80.1	903.29461
20 6 15	21 7 14	539.20289	83.2	929.40720

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. T.L.Tan, M.G. Gabona, G.B.Lebtron. The ν_{12} band of C_2D_4 . J Mol spectrosc 2011; 266:113–5.
2. Rothman L.S., Barbe A., Benner D.C., Brown L.R., Camy-Peyret C., Carleer M., et al. The HITRAN molecular spectroscopic database: edition of 2000 including updates through 2001 // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. – 2003. – V. 82. – pp. 5 – 44.
3. O.N.Ulenikov, O.V.Gromova, E.S.Bekhtereva, A.L.Fomchenko, Fangce Zhang, C. Sydow, C. Maul, S. Bauerecker. High resolution analysis of C_2D_4 in the region of 600 – 1150 cm^{-1} / Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer 182. – 2016. – p. 55 – 57.
4. Rothman L.S., Barbe A., Benner D.C., Brown L.R., Camy-Peyret C., Carleer M., et al. The HITRAN molecular spectroscopic database: edition of 2000 including updates through 2001 // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. – 2003. – V. 82. – pp. 50 – 67.
5. O.N. Ulenikov, O.V. Gromova, Yu.S. Aslapovskaya, V.M. Horneman, High resolution spectroscopic study of C_2H_4 : Re-analysis of the ground state and ν_4 , ν_7 , ν_{10} , and ν_{12} vibrational bands // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. – 2013. – V. 118. – P. 14-25.

**ТРЕХМЕРНАЯ ДОЗИМЕТРИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА СОЧЕТАННОГО КУРСА ЛУЧЕВОЙ
ТЕРАПИИ РАКА ШЕЙКИ МАТКИ**

Г.С.Модебадзе, Е.С.Сухих

Научный руководитель: старший преподаватель каф. ПФ, к.ф.-м.н., Е.С. Сухих

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: nekros@sibmail.com

**THREE-DIMENSIONAL DOSIMETRIC EVALUATION OF CONFORMAL RADIOTHERAPY
COMBINED WITH INTRACAVITARY BRACHYTHERAPY OF CERVICAL CANCER**

G.S.Modebadze, E.S.Sukhih,

Scientific Supervisor: PhD, E.S. Sukhikh,

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: nekros@sibmail.com

***Abstract.** In the present study, we performed the three-dimensional evaluation of the radiation load on critical organs in the course of combined radiotherapy in the Tomsk Regional Oncology. The results of the dose-volume distribution are given.*

Введение. Рак шейки матки (РШМ) остаётся одной из основных причин женской смертности по всему миру. Согласно данным Всемирной организации здравоохранения (ВОЗ), ежегодно регистрируют около 500 000 больных РШМ, что составляет 5% всех онкологических заболеваний, и приблизительно 200 000 женщин погибают с этим диагнозом [1].

Лучевая терапия считается эффективным методом лечения больных, местно-распространенным РШМ и применяется в большинстве случаев в качестве самостоятельного метода лечения опухоли данной локализации.

Современная радиационная онкология направлена на разработку и совершенствование различных способов повышения эффективности лечения онкологических больных. За последние десятилетия произошло значительное совершенствование методов наружного и внутреннего облучения. Современные успехи лучевой терапии РШМ во многом обусловлены также большими достижениями клинической радиобиологии, клинической дозиметрии, высоким научно-техническим уровнем топометрической подготовки и воспроизведения результатов лечения. Вместе с тем несмотря на значительные успехи в лечении больных РШМ, достигнутые за последние 25-30 лет, результаты все еще не могут считаться удовлетворительными.

Одним из направлений научно-практической деятельности радиационных онкологов является повышение эффективности лечения больных РШМ путем разработки и совершенствования методов сочетанной лучевой терапии. После начала применения данных методик 5-ти летняя выживаемость начала возрастать. Сочетанная лучевая терапия служит ведущим компонентом мультимодальной (сочетанной) терапии РШМ, которая состоит из сочетания дистанционной лучевой терапии и внутрисполостной брахитерапии. В качестве самостоятельного метода или как компонент

комбинированного лечения лучевую терапию используют более чем у 90% больных РШМ. Для данной методики необходимо проводить оценку распределения дозы в 3D, оценивать лучевые нагрузки на критические органы, но с другой стороны существует положительная сторона – увеличение дозы на мишень, из чего следует повышение эффективности ЛТ без превышения нагрузок на критические органы [2].

Целью данной работы является проведение трехмерной дозиметрической оценки сочетанного курса лучевой терапии рака шейки матки.

Материалы и методы исследования. В Томском областном онкологическом диспансере в рамках сочетанной лучевой терапии используется дистанционная лучевая терапия, осуществляемая на аппарате Elekta Synergy с энергией фотонного пучка 6 МВ и внутриволостная брахитерапия – на аппарате MultiSource HDR с источником излучения Co-60.



Рис. 1. Аппарат Multisource HDR



Рис. 2. Линейный ускоритель Elekta Synergy

Для трехмерной дозиметрической оценки сочетанного курса лучевой терапии рака шейки матки выбраны 5 пациентов с раком шейки матки. Затем провели полное клиническое обследование пациента, в ходе которого определили локализацию, степень распространенности, стадию и морфологический тип опухоли. После чего лучевой терапевт выбирал методику лечения, исходя из данных полного клинического обследования и существующих стандартов, и протоколов, а затем записал на первичную симуляцию.

Первичная симуляция осуществляется лучевым терапевтом, рентгенологом и медицинским физиком. Топомерию на компьютерном томографе (КТ) для планирования лучевой терапии провели совместно рентгенлаборант симулятора и рентгенлаборант компьютерного томографа, на основе составленного врачами рентгенологом и лучевым терапевтом плана КТ-обследования [3]. Топометрист нанес на кожу пациента метки по проекции лазеров: двух боковых, продольного и поперечного (аксиального), а также метку для референтной точки. После чего полученные снимки переданы радиологам для оконтуривания критических органов и зон облучения. На следующем этапе работы данные КТ-снимки отправлены на планирующую станцию для создания планов дистанционной лучевой терапии в планирующей системе ХЮ, а также планов внутриволостной брахитерапии в планирующей системе HDRPlus.

Перед экспортированием КТ-снимков дистанционной лучевой терапии из ХЮ в HDRPlus созданы контуры на основе изодозных распределений для 107, 100, 95, 90 и 50 изодоз.

Затем выполнено объединение КТ-снимков, при помощи функции FUSION в HDRPlus. Для оценки суммарной дозы на критические органы и область облучения выполнено повторное оконтуривание данных анатомических структур. И на последнем этапе работы собрана статистика доза-объем из вкладки Histogram.

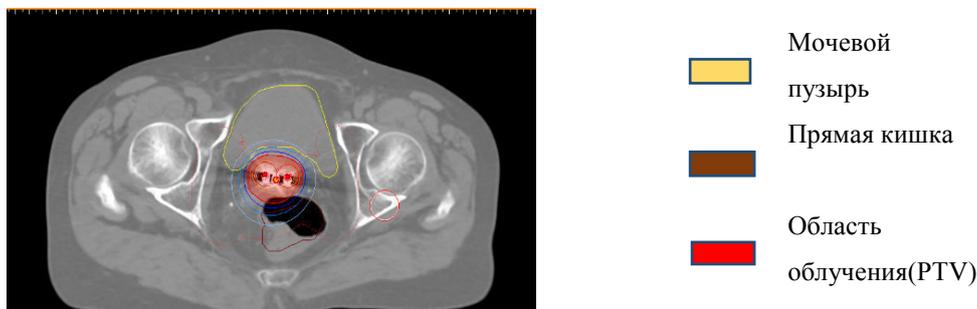


Рис. 3. КТ-срез с контурами критических органов и PTV, сделанными в HDRPlus

В таблице номер один представлены предписанные дозы для 5 пациентов с раком шейки матки для курса дистанционной лучевой терапии и брахитерапии.

Таблица 1

Предписанный дозы для пациентов в рамках данного исследования

№ пациент	Доза (Гр)		
		Дистанционная ЛТ	брахитерапия
1	Пациент №1	50	4фр*7
2	Пациент №2	50	4фр*7
3	Пациент №3	50	4фр*7
4	Пациент №4	44	4фр*6
5	Пациент №5	44	4фр*7

Результаты. Во время проведения сочетанного курса лучевой терапии для 5 пациентов с раком шейки матки подведена суммарная доза 56.82 Гр, 55.21 Гр, 55.18 Гр, 50.71 Гр, 48.61. По международному протоколу EMBRACE для данного вида терапии установлен диапазон значений 55-65 Гр. Таким образом курсы сочетанной лучевой терапии проведены в рамках международного протокола EMBRACE [4].

Заключение. В рамках данной работы проведена 3D оценка сочетанного курса лучевой терапии рака шейки матки в соответствии с протоколом EMBRACE.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Климанов В.А., Радиобиологическое и дозиметрическое планирование лучевой и радионуклидной терапии, часть 1, 2011, стр.348-350.
2. Климанов В.А., Радиобиологическое и дозиметрическое планирование лучевой и радионуклидной терапии, часть 2, 2011, стр.198-204, 244-251.
3. Труфанов Г.Е., Асатурян М.А., Лучевая терапия: учебник, том 2, 2010, стр.192.
4. EMBRACE collaborative group, A European study on MRI-guided brachytherapy in locally advanced cervical cancer(EMBRACE), Version 17-01-2008.

**ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ УСТРОЙСТВ РЕАКТОРА
ИРТ-Т ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЙ БОР-НЕЙТРОНЗАХВАТНОЙ ТЕРАПИИ**

П.А. Молодов, М.Н. Аникин, А.Г. Наймушин

Научный руководитель: доцент, к.ф.-м.н. А.Г. Наймушин

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: molodovpavel@gmail.com

**THE PROSPECTS OF USING IRT-T REACTOR EXPERIMENTAL FACILITIES FOR BORON
NEUTRON CAPTURE THERAPY RESEARCH**

P.A. Molodov, M.N. Anikin, A.G. Naymushin

Scientific Supervisor: associate professor, A.G. Naymushin

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: molodovpavel@gmail.com

***Abstract.** Investigation on the use of IRT-T research reactor experimental facilities for Boron Neutron Capture Therapy (BNCT) applications was performed by calculating beam parameters at the horizontal channels' exits. Calculations were performed using MCU-PTR Monte-Carlo code, developed by Kurchatov Institute and verified for IRT-T reactor modeling. It has been established, that HEC-1 channel can be used for BNCT applications if a neutron scatter and an appropriate Beam Shaping Assembly (BSA) are designed and placed into the channel.*

Введение. Лучевая терапия, в которой нуждается не менее 65-70% всех больных злокачественными новообразованиями, является самым востребованным методом противоопухолевого лечения. Лучевая терапия имеет целый ряд серьезных ограничений, поскольку полного уничтожения опухоли можно добиться лишь подведением суммарных доз, заведомо превышающих толерантность нормальных тканей. Одним из методов повышения эффективности лучевого воздействия является использование излучений с высокой линейной передачей энергии. Наиболее перспективным, но, одновременно, и наиболее сложным методом является нейтронзахватная лучевая терапия (НЗТ).

Бор-нейтрон-захватная терапия – бинарная технология лучевой терапии, основанная на возможности изотопа ^{10}B поглощать тепловые нейтроны в результате реакции $^{10}\text{B}(n,\alpha)^7\text{Li}$. Продукты данной реакции быстро тормозятся и выделяют энергию 2,3 МэВ на длине ~ 10 мкм, что обеспечивает возможность селективного поражения раковых клеток [1].

Для успешной реализации в клинической практике потенциальных возможностей БНЗТ должен быть решен комплекс химических, биологических, медицинских и физико-технических проблем. Основные направления развития метода БНЗТ касаются создания компактных специализированных источников нейтронов, методов определения концентрации бора в тканях в реальном масштабе времени и разработки новых селективных боросодержащих препаратов нового поколения [2]. Для экспериментальных исследований по указанным направлениям на реакторе ИРТ-Т проведено расчетное обоснование возможности использования экспериментальных устройств для целей нейтронзахватной терапии.

Материалы и методы исследования. Реактор ИРТ-Т – исследовательский реактор бассейного типа с использованием в качестве замедлителя, теплоносителя и верхней защиты обессоленной воды и бериллия в качестве отражателя. Реактор предназначен для проведения научно-исследовательских работ по физике твердого тела, нейтронно-активационному анализу элементного состава веществ, производству радионуклидов, легированию кремния, нейтронной радиографии. Реактор имеет 10 горизонтальных экспериментальных каналов (ГЭК) для вывода пучка нейтронов и облучения образцов: 8 радиальных диаметром 100 мм из нержавеющей стали и два касательных диаметром 150 мм. Для облучения за пределами корпуса активной зоны, в водном отражателе, имеется 10 вертикальных каналов из алюминия АД-1 с диаметрами 70, 55 и 25 мм. В некоторых горизонтальных и вертикальных каналах имеются пневмотранспортные устройства.

Для расчетного обеспечения исследований по НЗТ разработана модель исследовательского реактора ИРТ-Т (рисунок 1) в программном комплексе MCU-PTR [3], подробно описывающая реальную геометрию активной зоны реактора и экспериментальных устройств. Программа MCU (Monte-Carlo Universal) разработана в НИЦ «Курчатовский Институт» и предназначена для моделирования процессов переноса излучения (нейтронов, гамма-квантов, электронов и позитронов) методами Монте-Карло в 3-D геометрии с использованием библиотек ядерных данных в непрерывном и групповом представлении. Версия MCU-PTR аттестована для расчётов нейтронно-физических характеристик исследовательского ядерного реактора ИРТ-Т [4].

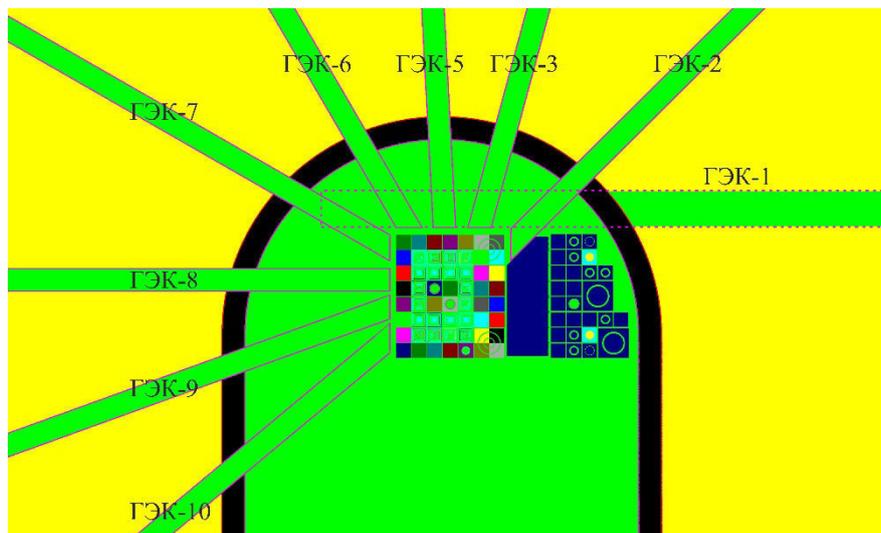


Рис. 1. Модель реактора ИРТ-Т в программе MCU-PTR

Результаты. Для проведения НЗТ мировым сообществом выработаны требования к радиационным характеристикам поля излучения пучка, степень выполнения которых характеризует качество данного пучка по отношению к НЗТ [1]. На основе многовариантных расчетов методом Монте-Карло по программе MCU-PTR были оценены следующие характеристики полей излучений на выходах горизонтальных каналов: плотности потоков тепловых (Φ_T), эпитепловых ($\Phi_{эпн}$) и быстрых ($\Phi_{быстр}$) нейтронов, отношение мощности поглощенной дозы гамма-излучения к плотности потока тепловых/эпитепловых нейтронов (\dot{D}_γ/Φ_T ; $\dot{D}_\gamma/\Phi_{эпн}$), отношение поглощенной дозы быстрых нейтронов к

плотности потока тепловых/эпитепловых нейтронов ($\dot{D}_{\text{быстр}}/\Phi_{\text{т}}$; $\dot{D}_{\text{быстр}}/\Phi_{\text{эпи}}$). Результаты расчетов представлены в таблице 1.

Таблица 1

Плотности потоков 3-х групп нейтронов и мощности доз для горизонтальных каналов

	$\Phi_{\text{т}}$, н/см ² /с	$\Phi_{\text{эпи}}$, н/см ² /с	$\Phi_{\text{быстр}}$, н/см ² /с	$\dot{D}_{\text{быстр}}/\Phi_{\text{т}}$, Гр·см ²	$\dot{D}_{\text{быстр}}/\Phi_{\text{эпи}}$, Гр·см ²	$\dot{D}_{\gamma}/\Phi_{\text{т}}$, Гр·см ²	$\dot{D}_{\gamma}/\Phi_{\text{эпи}}$, Гр·см ²
ГЭК-1	8,41E+08	1,07E+08	1,28E+08	3,78E-10	2,96E-09	2,17E-11	1,70E-10
ГЭК-2	1,98E+09	3,85E+08	6,28E+08	8,98E-10	4,63E-09	1,59E-10	8,17E-10
ГЭК-3	2,78E+09	9,59E+08	2,36E+09	2,51E-09	7,27E-09	1,75E-10	5,06E-10
ГЭК-5	3,80E+09	1,68E+09	3,83E+09	2,94E-09	6,67E-09	1,39E-10	3,14E-10
ГЭК-6	2,52E+09	1,02E+09	2,53E+09	2,96E-09	7,34E-09	2,01E-10	4,99E-10
ГЭК-7	2,42E+09	1,03E+09	2,48E+09	3,01E-09	7,08E-09	1,80E-10	4,25E-10
ГЭК-8	3,46E+09	1,66E+09	3,51E+09	2,94E-09	6,13E-09	1,24E-10	2,59E-10
ГЭК-9	3,50E+09	1,65E+09	3,35E+09	2,74E-09	5,83E-09	1,16E-10	2,46E-10
ГЭК-10	1,62E+09	6,98E+08	1,45E+09	2,60E-09	6,05E-09	1,42E-10	3,30E-10

Заключение. По абсолютным значениям плотностей потоков тепловых и эпитепловых нейтронов касательный канал ГЭК-1 уступает радиальным, что обусловлено большей длиной канала ГЭК-1. Однако, меньший вклад быстрых нейтронов и гамма-квантов делает канал ГЭК-1 предпочтительным вариантом для создания установки НЗТ. С помощью размещения в канале нейтронного рассеивателя и модификатора спектра нейтронов можно значительно улучшить нейтронно-физические параметры установки. Основным недостатком канала ГЭК-1 является его длина, составляющая 4 м. Для сокращения расстояния между активной зоной и выходом канала разрабатывается проект блока вывода пучка с заменой существующего шибера, длиной 1,65 м, на более компактный. Указанные пути модернизация канала позволят создать облучательную установку для проведения широкого спектра исследований в области изучения воздействия теплового пучка нейтронов на клеточные культуры и биологические объекты.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Current status of neutron capture therapy: IAEA-TECDOC-1223 // Technical reports series. International Atomic Energy Agency. – Vienna, 2001.
2. Таскаев С. Ю., Каньгин В. В. Бор-нейтронозахватная терапия // Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2016. 216 с. – 2016.
3. Alekseev N. I. et al. MCU-PTR program for high-precision calculations of pool and tank type research reactors // Atomic energy. – 2011. – Т. 109. – №. 3. – P. 149-156.
4. Shchurovskaya M. V. et al. Validation of the MCU-PTR computational model of beryllium poisoning using selected experiments at the IRT-T research reactor // Annals of Nuclear Energy. – 2018. – Vol. 113. – P. 436-445.

**ЯДЕРНО-ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ АНАЛИЗА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ
СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИХ ИСТОЧНИКОВ ИЗЛУЧЕНИЯ**

И.В. Морева

Научный руководитель: старший научный сотрудник, В.В. Сохорева
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: iren9511@gmail.com

**NUCLEAR-PHYSICAL METHODS OF ANALYSIS USING
SPECTROMETRIC RADIATION SOURCES**

I.V. Moreva

Scientific Supervisor: Senior Researcher, V.V. Sokhoreva

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: iren9511@gmail.com

***Abstract.** To analyze the nuclear-physical methods of elemental composition and distribution of impurities by the method of Rutherford backscattering, the ^{238}Pu source was used as the source of ionizing radiation. It was shown that in the absence of an accelerator this method is promising, since it allows one to monitor the composition and distribution of elements during technological processes.*

Введение. При разработке материалов для ядерной энергетики необходимо учитывать все возрастающие требования к эксплуатационным и конструкционным характеристикам. Применение ядерно-физических методов для анализа данных на стадии разработок и формирование таких материалов позволяют выбрать наиболее перспективные технологии. В основе ядерно-физических методов лежит взаимодействие ионизирующих излучений с атомами ионов вещества. Наиболее перспективным методом следует отнести метод резерфордского обратного рассеяния. Метод позволяет определять состав и распределение элементов по глубине, взаимодиффузию на границе раздела материала без разрушения образца [1].

Однако, для реализации этих методов необходим ускоритель заряженных частиц, ЭСГ-2,5. В отсутствие ускорителя возможно применение в качестве источника ионизирующего излучения спектрометрические источники.

Целью данной работы было исследование возможности использования в качестве источника ионизирующего излучения спектрометрические источники.

Материалы и методы исследования. Техника метода состоит в облучении образцов ионами с одновременной регистрацией упругорассеянных частиц энергетическими спектрометрами. Энергия и интенсивность несут количественную информацию об элементном составе пленок и глубине залегания примеси [2].

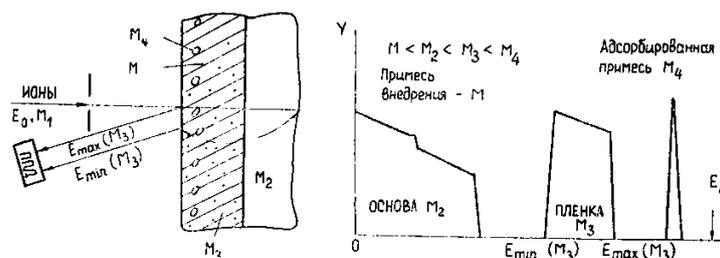


Рис. 1. Схема упругого рассеяния, энергетический спектр POF и блок-схема спектрометрического тракта

Результаты. Для проведения эксперимента в установку был установлен калиброванный плутониевый альфа-источник ^{238}Pu (E_{α} равное 5456 кэВ) в специально изготовленном корпусе с размером выходного окна 8 мм. Альфа-источник был установлен как можно ближе к оси ионопровода, при этом необходимо было достичь значения угла θ наиболее близкого к 180 градусам, в данной работе он составляет приблизительно 160 градусов, и при этом не допустить перекрытие альфа-источником датчика. Для калибровки датчика (рис.2) использовался радиевый калиброванный альфа-источник ^{226}Ra (E_{α} равное 4784,4 кэВ; 5489,5 кэВ; 6002,4 кэВ; 7684,9 кэВ).

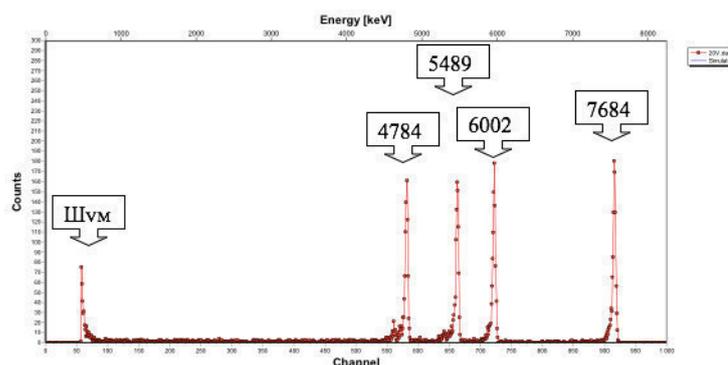


Рис. 2. Калибровочный энергетический спектр для радиевого (^{226}Ra) альфа-источника

В результате калибровки была определена ширина канала анализатора, она составила 8,25 кэВ/канал.

Для проведения данного эксперимента были изготовлены тонкие пленки методом магнетронного распыления на лавсан ($\text{C}_{10}\text{H}_8\text{O}_4$), данный материал был выбран в качестве подложки т.к. имеет в своем составе только легкие атомы, что позволит исключить влияние энергетических спектров подложки, на энергетические спектры тонких пленок исследуемых образцов с более тяжелым атомарным составом.

В результате были получены 3 пленки: Мо; Мо/Та; Мо/Та/В. Энергетический спектр для пленки молибдена (Мо) представлен на рис.3.

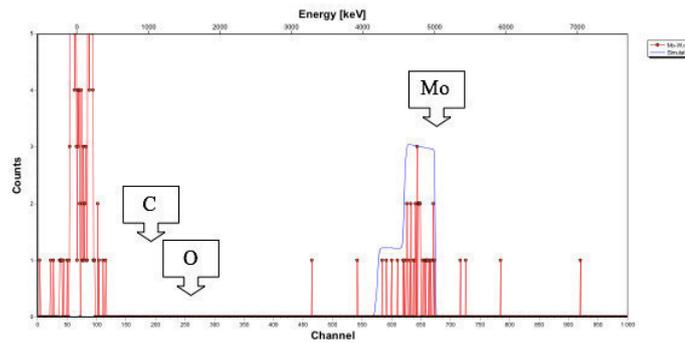


Рис. 3. Энергетический спектр для пленки молибдена (Mo) экспериментальный и модельный

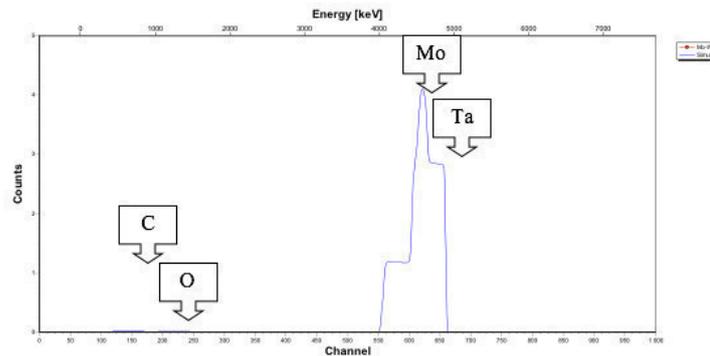


Рис. 3.1. Энергетический спектр для структуры молибден-тантал (Mo/Ta) модельный

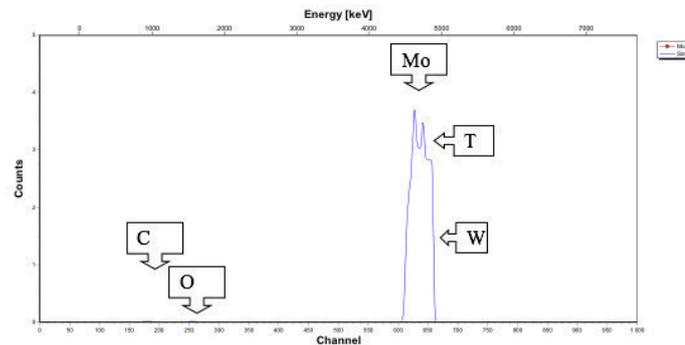


Рис. 3.2. Энергетический спектр для структуры молибден-тантал-ванадий (Mo/Ta/W) модельный

Заключение. Результаты показали, что в отсутствие ускорителя возможно использование альфа-источников для отработки технологических процессов. Также возможно использование в установках непосредственно для имплантации ионов в материалы, следить за процессом внедрения ионов, определение их глубины проникновения и распределение по глубине.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Буркова И. Е., Заводчиков В.М., Ятис А.А., Сохорева В.В., Мирончик В.Г., Малютин В.М., Зуев А.В. Разработка и внедрение метода Резерфордского обратного рассеяния для создания новой полупроводниковой технологии и оптимизации имеющихся техпроцессов. / Томск, 1987 - 70с.
2. Ташлыкова–Бушкевич И. И. Метод Резерфордского обратного рассеяния при анализе состава твердых тел / Учеб. – метод. пособие – Мн: БГУИР, 2010 – 52 с.

**ФАЗОВЫЙ СОСТАВ И ОСОБЕННОСТИ РАЗРУШЕНИЯ ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ
АУСТЕНИТНОЙ НЕРЖАВЕЮЩЕЙ СТАЛИ, ПОДВЕРГНУТОЙ ИОННОМУ АЗОТИРОВАНИЮ**

В.А. Москвина^{1,2}, Г.Г. Майер², Е.В. Мельников²

Научный руководитель: доцент, д.ф.-м.н. Е.Г. Астафурова²

¹Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН,

Россия, г. Томск, пр. Академический, 2/4, 634055

E-mail: valya_moskvina@mail.ru

**PHASE COMPOSITION AND FRACTURE CHARACTERISTICS OF A SURFACE LAYER IN
AUSTENITIC STAINLESS STEEL SUBJECTED TO ION NITRIDING**

V.A. Moskvina^{1,2}, G.G. Maier², E.V. Melnikov²

Scientific Supervisor: assistant professor, doctor of sciences (Phys & Math) E.G. Astafurova²

¹National Research Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

²Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Russia, Tomsk, Akademichesky pr. 2/4, 634055

E-mail: valya_moskvina@mail.ru

Abstract. Phase composition and fracture characteristics of the surface layer of ion-nitrided austenitic stainless steel were studied. Ion nitriding of steel samples promotes to a surface hardening and changes phase composition of the surface layers of specimens. Nitrided specimens have inhomogeneous surface layers 17–22 μm in thickness, which are composed with nitrogen-doped austenite, α -phase, ϵ -martensite and nitrides of various composition.

Введение. Низкотемпературное ионное азотирование представляет собой процесс диффузионного насыщения поверхностного слоя металлов азотом в плазме тлеющего разряда [1]. Благодаря такой технологии поверхностного упрочнения возможно получать твердые и износостойкие поверхностные слои на аустенитных нержавеющей сталях. Азотирование в диапазоне низких температур (350–570°C) предотвращает образование нежелательной фазы CrN, однако глубина проникновения азота в поверхностный слой будет значительно меньше из-за пониженной скорости диффузии азота в материалах с ГЦК-решеткой. Авторами многих российских и зарубежных работ показано, что формирование зеренно-субзеренных, ультрамелкозернистых (УМЗ) и нанокристаллических (НК) структур с высокой концентрацией деформационных дефектов (границ зерен, дислокаций и двойников) в поверхностном слое металлов способствует более интенсивной диффузии азота в ГЦК и ОЦК решетку [2]. Наиболее эффективными методами предварительной пластической деформации перед процессом азотирования являются: дробеструйная обработка [3], кручение под высоким давлением [4], холодная прокатка [5] и др. Предварительное формирование высокодефектных состояний в сталях способствует образованию более толстых нитридных слоев при ионном азотировании. Тем не менее, морфология и фазовый состав, особенности деформации азотированных слоев в зеренно-субзеренных, УМЗ И НК материалах остаются малоизученными. Данная работа направлена на исследование изменения фазового

состава и морфологии поверхностного слоя аустенитной стали 01X17H13M3 после предварительной холодной прокатки и последующего низкотемпературного ионного азотирования.

Материалы и методы исследования. Закаленные заготовки стабильной аустенитной стали 01X17H13M3 (химический состав приведен в таблице 1) подвергали плоской прокатке при 300 К до степени осадки 80%.

Таблица 1

Химический состав стали 01X17H13M3 (мас.%)

Сталь	Состав						
	Cr	Ni	Mn	Mo	Si	C	Fe
01X17H13M3	16.84	13.29	1.72	2.72	0.59	0.01	Бал.

Ионное азотирование стальных образцов осуществляли при температуре 813 К в течение 12 часов при давлении рабочего газа $P = 300$ Па.

Результаты и обсуждение. Прокаткой в стали была сформирована неравновесная разориентированная зеренно-субзеренная структура с высокой плотностью деформационных дефектов. Средний размер элементов структуры составил $D=220\pm 50$ нм, в них наблюдалась высокая плотность дислокаций $\rho = 5 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$. На рисунке 1 представлены рентгенограммы для стали 01X17H13M3 в состоянии после прокатки и ионного азотирования. Анализ рентгенограммы после прокатки свидетельствовал о наличии пиков только от аустенитной фазы с параметром кристаллической решетки $a=0.3600\pm 0.0002$ нм (рис. 1). После прокатки на рентгенограмме наблюдали уширенные линии аустенита

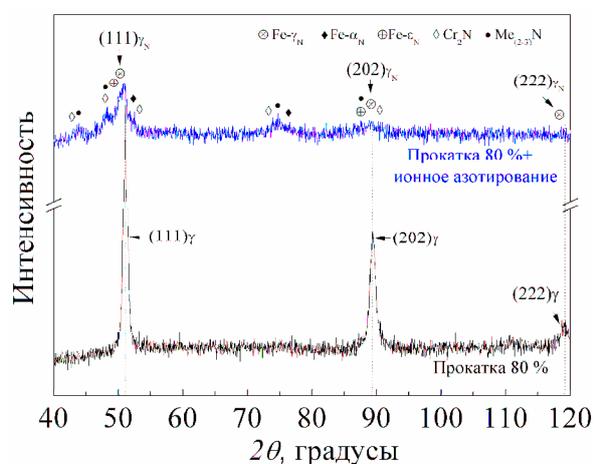


Рис.1. Рентгенограммы для стали 01X17H13M3

наблюдало снижение интенсивности, уширение и смещение пиков легированного азотом аустенита $(111)\gamma_N$, $(202)\gamma_N$, $(222)\gamma_N$ относительно положения пиков $(111)\gamma$, $(202)\gamma$ и $(222)\gamma$ на рентгенограммах для прокатанных образцов. Параметр решетки азотистого аустенита γ_N после азотирования находится в интервале $a=0.3643-0.3688$ нм. Это свидетельствует о твердорастворном упрочнении стали азотом и формировании неоднородной концентрации азота в аустените по толщине азотированного слоя.

На рисунке 2 представлены СЭМ изображения поперечных изломов в разрушенных при растяжении образцах сталей до (а) и после ионного азотирования (б, в). Анализ изображений для прокатанных образцов свидетельствует о вязком (ямочном) характере разрушения (рис. 2, а).

$(111)\gamma$, $(202)\gamma$ и $(222)\gamma$, что свидетельствует о формировании высокодефектной неравновесной структуры: области когерентного рассеяния составляли $D_{hkl}=100$ нм, а микродеформация кристаллической решетки $\Delta d/d=4 \cdot 10^{-3}$.

Рентгенограмма для образцов, подвергнутых ионному азотированию свидетельствует о наличии пиков от легированного азотом аустенита, небольшой доли азотистого феррита, ϵ -фазы, а также нитридов различного состава Cr_2N , $\text{Me}_{(2,3)}\text{N}$, Fe_4N (рис. 1). На рентгенограммах, полученных с использованием азотированных образцов,

В азотированных образцах, разрушение азотированного слоя происходит хрупко по механизму квазискола (рис. 2, б, в). Толщина поверхностного азотированного слоя неоднородна и составляет 17–22 мкм. Между азотированным слоем и вязкой матрицей наблюдали зону внутреннего азотирования шириной ≈ 40 мкм, для которой характерно твердорастворное упрочнение аустенитной матрицы без образования большого количества мартенсита и нитридов. Поэтому характер разрушения в ней отличен от вязкого разрушения в центральной части образцов и хрупкого скола на поверхности (рис. 2, б).

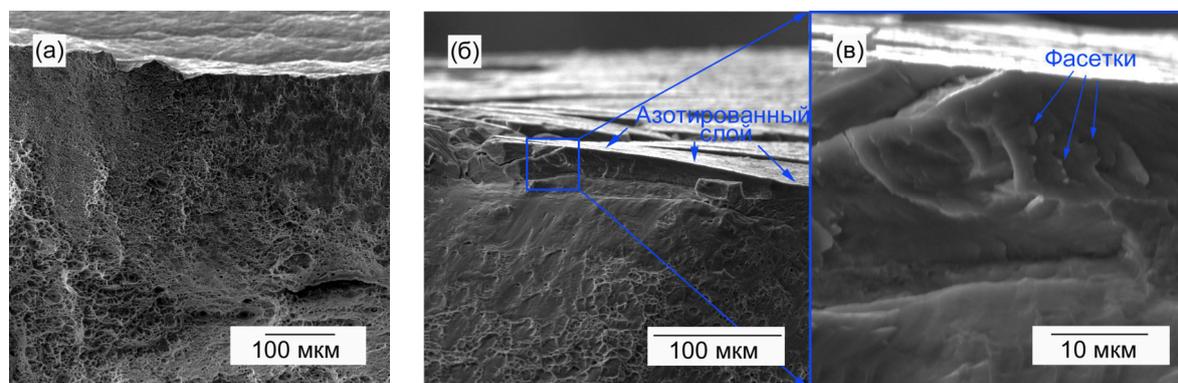


Рис.2. СЭМ-изображения поверхностей излома образцов аустенитной стали после прокатки (а) и после ионного азотирования (б, в)

Заключение. Ионное азотирование аустенитной стали с неравновесной зеренно-субзеренной структурой, сформированной холодной прокаткой, способствует формированию широкого (до 22 мкм) азотированного слоя на поверхности образцов. Фазовый состав азотированного слоя представлен легированным азотом аустенитом, азотистым ферритом, ϵ -мартенситом и дисперсными нитридами различного состава (Cr_2N , $\text{Me}_{(2,3)}\text{N}$, Fe_4N). Поверхностный азотированный слой разрушается хрупко – по механизму квазискола. Зона диффузионного влияния азота (зона внутреннего азотирования) характеризуется смешанным характером разрушения и содержит следы пластической деформации, а внутренняя часть образцов разрушается вязко с образованием ямочного излома по аналогии с образцами, не подвергнутыми ионному азотированию.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Sun Y., Bell. T. Sliding wear characteristics of low temperature plasma nitrided 316 austenitic stainless steel // *Wear*. – 1998. – № 218. – P. 34–42.
2. Tong W.P. Nitriding iron at lower temperatures // *Science*. – 2003. – № 299. – P. 686–688.
3. Tong W.P., Han Z., Wang L.M. Low-temperature nitriding of 38CrMoAl steel with a nanostructured surface layer induced by surface mechanical attrition treatment alloy // *Surface & Coatings Technology*. – 2008. – № 202. – P. 4957–4963.
4. Ferkel H., Glatzer M., Estrin Y., Valiev R.Z., Blawert C., Mordike B.L., RF plasma nitriding of severely deformed iron-based alloys // *Mater. Sci. Eng. A*. – 2003. – № 348. – P. 100–110.
5. Nishimoto A., Akamatsu K., Effect of pre-deforming on low temperature plasma nitriding of austenitic stainless steel // *Plasma Process. Polym.* – 2009. – № 6. – P. 306–309.

СОРБЦИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ И АТОМАРНЫХ ГАЗОВ УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ

Д.А. Мустахиева

Научный руководитель: ассистент отделения экспериментальной физики Л.В. Никитина

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: mustakhievadi@mail.ru

SORPTION OF MOLECULAR AND ATOMIC GASES BY CARBON NANOTUBES

D.A. Mustakhieva

Scientific Supervisor: Assistant of the Department of Experimental Physics L.V. Nikitina

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: mustakhievadi@mail.ru

***Abstract.** The work is devoted to the studies of sorption of molecular and atomic gases by materials containing single-walled carbon nanotubes. Studies of various modification methods on sorption capacity.*

Введение. Водород, как универсальный, высокоэффективный и экологически чистый энергоноситель, открывает большие перспективы для его широкого применения в современной энергетике, особенно в качестве топлива для транспортных средств. Существует много различных дешёвых и экологически чистых способов получения водорода, однако возникают серьезные проблемы, которые препятствуют применению водорода в качестве топлива. Ни один из существующих в настоящее время способов хранения водорода не удовлетворяет требованиям, предъявляемым к системам хранения, например департаментом энергетики России [1]. Поэтому разработка новых, более эффективных способов хранения водорода и его транспортировкой является важной задачей, успешное решение которой во многом определит дальнейший прогресс в развитии «водородной» энергетики.

В 1991 году японская корпорация NEC с помощью высокоразрешающей электронной микроскопии обнаружила некие структуры в форме трубок с диаметрами от 3 до 10 нанометров и длиной нескольких микрон или даже миллиметров. В последствии, это необычное открытие стало носить название - «углеродные нанотрубки» [2].

Краткие сведения об одностенных углеродных нанотрубках. Углеродные нанотрубки имеют неоспоримые преимущества перед другими нанотматериалами. Их физические и химические свойства показывают, что они обладают высокой адсорбционной способностью. Объясняется это тем, что нанотрубки имеют особую структуру, где все атомы сосредоточены на поверхности. Это позволяет нам судить о высокой удельной поверхности материала [3]. Одновременно с открытием сферических форм углерода в 1991г. ученые обнаружили цилиндрические протяженные структуры графитового слоя [4]. Такого рода структуры получили название углеродных нанотрубок (УНТ). Конфигурация нанотрубок – не что иное, как полые протяженные наноструктуры цилиндрической формы. Стенки их образованы гексагонами, на вершинах которых расположены атомы углерода. Их типичные размеры в диаметре колеблются от 1 до 10 нм, а по длине – от 50 до 100 нм. Геометрические параметры трубок описывают

при помощи базисных векторов исходного слоя, используя так называемые хиральные вектора $c_h = na_1 + ma_2$.

Методы исследования. Для того чтобы изучить сорбционные свойства углеродных нанотрубок использовался метод термодесорпционной масс-спектрометрии. Исследовательский автоматизированный комплекс Gas Reaction Controller (GRC) является одним из видов экспериментальных установок для исследования водородной проницаемости через материал с использованием метода термодесорпционной масс-спектрометрии.

Изучение сорбционной способности при односторонней проницаемости газов определяется концентрацией поглощенного газа при различных температурах (от комнатной до 900 °С) и давлениях (максимальное давление 50 атм.).

Методы модифицирования. Эксперименты по модифицированию одностенных углеродных нанотрубок с использованием окисляющих веществ проводились только для многослойной структуры. В качестве окисляющих реагентов в следующих работах чаще всего использовали кислородсодержащие кислоты и их смеси на их основе: HNO₃, HNO₃ + H₂SO₄, H₂SO₄, H₂SO₄ + KMnO₄, H₂SO₄ + H₂O₂.

Обработка кислотами обычно представляет собой многочасовой (до 24ч) процесс, осуществляемый при нагревании или кипячении реакционной массы. Формирующиеся кислородсодержащие функциональные группы в первую очередь присоединяются к местам первоначальных дефектов и к концевым участкам УНТ. Также окислительная обработка может привести к отмыванию частиц металлоксидного катализатора, открытию концов, укорочению отдельных трубок и фрагментации боковых стенок на карбоксилированные участки [5].

Существующие методы синтеза не позволяют получить материал, состоящий только из нанотрубок одного типа. Образцы, получаемые разными методами синтеза, обычно содержат связки одностенных нанотрубок, частицы катализатора и аморфный углерод. Для удаления побочных продуктов используется процедура отжига образцов с последующей обработкой в концентрированных кислотах. Однако, результатом очистки материала может являться образование вакансионных и топологических дефектов в стенках трубок.

Отжиг нанотрубок может проводиться не только в кислородной среде, но и на воздухе, в инертной среде или в вакууме. Данный способ обработки также уменьшает количество дефектов на поверхности углеродных нанотрубок и способствует образованию закрытых углеродных нанотрубок. В работе [6] отмечается, что отжиг углеродных нанотрубок с последующей обработкой соляной кислотой, а также функционализация нанотрубок с прививкой на поверхности полярных карбоксильных групп приводит к изменению структуры и топологии поверхности нанотрубок. В случае функционализированных нанотрубок повышается активность поверхности, что приводит к усилению склонности к «слипанию».

Результаты сорбции углеродными нанотрубками. Для проведения экспериментов было подготовлено 9 образцов. Одностенные углеродные нанотрубки в чистом виде представляют собой порошкообразный волокнистый материал, который перед началом эксперимента был спрессован в специально подготовленной форме с помощью обычного гидравлического пресса под давлением около 1,2 МПа. В результате были получены образцы в форме таблеток размером 3 мм в высоту и 6,5 мм в диаметре. Эксперименты по изучению процессов сорбции газов выполняются в следующей

последовательности: образец взвешивается, масса и плотность заносятся в программу комплекса. Затем образец помещается в камеру, которая подсоединяется к вакуумной системе и вакуумируется до 0,12 атм. Далее осуществляется линейный нагрев с непрерывной откачкой. Затем следовало постепенное охлаждение образца с последующим насыщением. С заданной периодичностью значения давления и концентрации записывались в файл. Данный режим обычно используется для подготовки образцов с заранее заданными свойствами и изучения влияния описанных выше процессов на структуру образцов [7].

Данные, полученные с комплекса, представлены на рис 1. Из графика видно, что в процессе насыщения при повышении давления массовый процент содержания в случае а – водородом, б – гелием, в – аргоном, увеличивается.

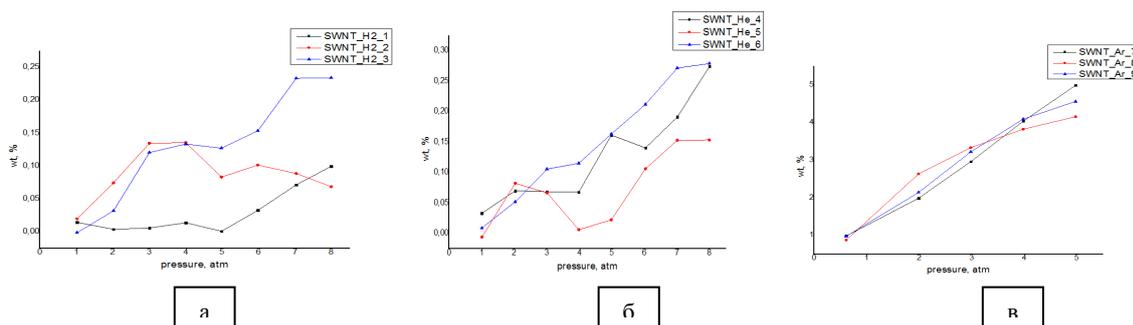


Рис.1. – Зависимость давления в камере от массового процента, а – насыщение водородом, б – насыщение гелием, в – насыщение аргоном.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гамбург Д.Ю. Водород. Свойства, получение, хранение, транспортирование, применение: Справ. Издание. – М.: Химия, 1989. – 672 с.
2. А.В.Елецкий, Углеродные нанотрубки и их эмиссионные свойства// Успехи Физических Наук/– 2002.–Т. 172.–№4.–С. 401;
3. Harris P. J. F. Carbon nanotubes and related structures // New materials for the Twenty-first Century, Cambridge University Press, Cambridge /–1999.–P. 277;
4. Елисеев А. А., Лукашин А. В. Функциональные наноматериалы. Под ред. Ю.Д. Третьякова.М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. - 456 с. ISBN 978-5-9221-1120-1;
5. Solution Properties of Single-Walled Carbon Nanotubes / J. Chen, M.A. Hamon, H. Hu et al. // Science. – 1998. – V. 282. – P. 95-98.
6. Е.С. Климов, А.В. Исаев, К.Н. Нищев и др. Изменение структуры многостенных углеродных нанотрубок при физико – химической обработке// Известия Самарского научн. Центра РАН. Т. 16. N4(3). 2014.
7. Кудияров В.Н., Лидер А.М. Изучение процессов сорбции и десорбции водорода при помощи автоматизированного комплекса Gas Reaction Controller LP – Томск: Национальный исследовательский Томский политехнический университет.2013. – 6 с.

**МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОТРУБОК В ВОДОРОДНОЙ АТМОСФЕРЕ МЕТОДОМ
МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ**А.В. Николаева

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук, Н. В. Чистякова
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050
E-mail: philip371g@gmail.com

**MODELING OF NANOTUBES IN THE HYDROGEN ATMOSPHERE BY THE METHOD OF
MOLECULAR DYNAMICS**A.V. Nikolaeva

Scientific Supervisor – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, N. V. Chistyakova
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050
E-mail: philip371g@gmail.com

***Abstract.** In the present study, there is an investigation of the processes of hydrogen absorption by one-layered carbon nanotubes with a usage of the molecular dynamics method. In order to describe this system, there were selected Airebo potential. Besides, there was analyzed the behavior of the atoms of hydrogen and carbon in the isotropic process. Moreover, there was determined, that hydrogen is absorbed on the opened edges of nanotubes.*

Введение. Водород – экологически чистый и высокоэффективный дешевый энергоноситель. В настоящее время транспортировка и хранение водорода в газовом или жидком состоянии в баллонах не является как эффективным, так и безопасным методом. Для производства действенных хранилищ водорода под высокими давлениями требуются высокопрочные стали и специальные материалы для предотвращения утечек. При хранении водорода в жидком состоянии потери связаны с расхолаживанием системы при заправке, а также испарением водорода во время хранения.

Хранение водорода в адсорбированном состоянии углеродными нанотрубками (УНТ) поможет решить проблему его безопасного хранения и транспортировки. Нанотрубки могут быть использованы в качестве контейнера для хранения водорода, сохраняя его плотность.

УНТ химически стабильны, имеют незначительную массу и сравнительно недороги, что делает их идеальным материалом для хранения водорода в адсорбированном состоянии. При нагревании водород может медленно высвободиться из углеродных материалов. Диаметр трубок от десяти до нескольких десятков нанометров и длина может достигать нескольких сантиметров. Нанотрубки состоят из одной или нескольких гексагональных графитовых плоскостей свёрнутых в трубку [1].

Материалы и методы исследования. В настоящей работе в программе VMD [2] построена однослойная углеродная нанотрубка с индексами хиральности (50, 5) и длиной 50 Å ($d = 37.3488$ Å), концы трубки открыты (рис. 1).

В МД программе LAMMPS [3] была создана расчетная область размером (-60, 60, -60, 60, 0, 120). В начальный момент времени в расчетную область импортировалась нанотрубка, созданная в VMD.

Вокруг трубки в случайном порядке с помощью команды `create_atoms` создавались 50 атомов водорода. Всем атомам расчетной области задавалась температура 500 К и давление 2 атм при изотропном процессе. Уравнения динамики решались с постоянным шагом по времени $dt = 10^{-16}$ с.

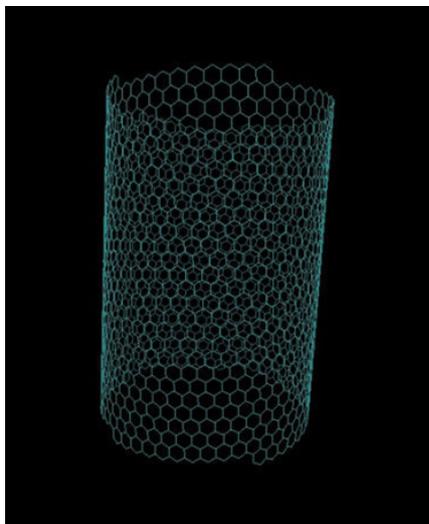


Рис.1. Углеродная нанотрубка

При этом учитывались три типа взаимодействия: взаимодействие атомов Н между собой; взаимодействие атомов С между собой; взаимодействие между атомами Н и С. Эти взаимодействия описывались с помощью потенциала Airebo.

С помощью программы Ovito [4] получили кадры состояния системы на первом и последнем шаге моделирования (рис. 2).

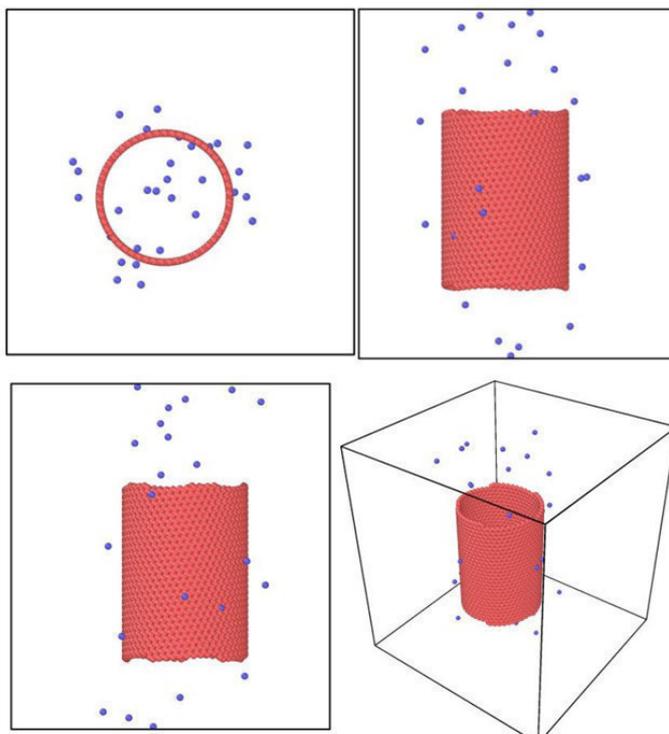


Рис.2. Состояния системы на первом шаге моделирования

Состояние системы на последнем шаге моделирования (рис. 3).

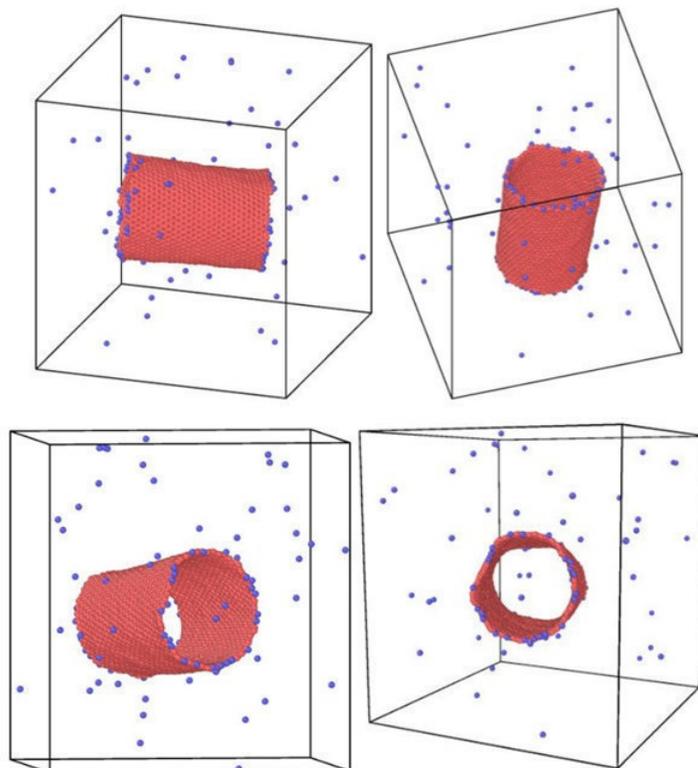


Рис.3. Состояния системы на последнем шаге моделирования

Предполагалось, что процессы физической адсорбции происходят на внешней поверхности нанотрубки. Анализируя фотографии из программы Ovito видно, что при температуре $T = 500$ К и давлении 2 атм на открытых краях нанотрубки образуются слои абсорбированных атомов водорода.

Заключение. Разработан код для программы LAMMPS, реализующий моделирование процессов адсорбции водорода углеродными нанотрубками на атомарном уровне. Написанный код планируется дополнить в дальнейшем и на его основе построить пучок нанотрубок.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Вахрушев А.В., Липанов А.М., Суетин М.В. Моделирование процессов аккумуляции водорода у углеводородов наноструктурами. Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований; НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2008
2. Visual Molecular Dynamics [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>
3. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://lammps.sandia.gov/>
4. The Open Visualization Tool [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://ovito.org/index.php/download>

**СТРУКТУРНО - МАСШТАБНЫЕ УРОВНИ ДЕФОРМАЦИИ ДВУХФАЗНОГО ТИТАНОВОГО
СПЛАВА**

Е.Н. Николенко, Т.С. Куницына

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м. н. Л.А. Теплякова
Томский государственный архитектурно-строительный университет,
Россия, г. Томск, пл. Соляная, 2. 634003
E-mail: kma11061990@mail.ru

DEFORMATION OF TWO –PHASE TITANIUM ALLOY AT DIFFERENT SCALE LEVELS

E.N. Nikolenko, T. S. Kunitsyna,

The scientific adviser: professor L. A. Teplyakova
Tomsk State University of Architecture and Building, Solyanaya sq., 2, Tomsk, Russia; 634003
E-mail: kma11061990@mail.ru

***Abstract.** The paper deals with the type VT6 alloy defect structure which forms nearby the fracture surface. The main types of the deformation substructure are identified at two scale levels, namely colonies and lamellas. The relationship between these types of the deformation substructure and scale levels is detected in this paper.*

Введение. Сплав типа ВТ6 относятся к числу наиболее распространенных двухфазных титановых сплавов. Это объясняется удачным его легированием. Алюминий в сплавах системы Ti-Al-V повышает прочностные и жаропрочные свойства, а ванадий относится к числу тех немногих легирующих элементов в титане, которые повышают не только прочностные свойства, но и пластичность. Благодаря этому сплав может выдерживать значительные нагрузки. Однако, при ударном нагружении, когда скорость механического воздействия достаточно велика, он проявляет ярко выраженную локализацию деформации, которая приводит к быстрому разрушению материала. Очевидно, что локализация деформации в данном сплаве связана с особенностями структурно-фазового состояния и закономерностями его изменения при высокоэнергетическом механическом воздействии.

Между тем, сплав ВТ6 в этом отношении мало изучен даже в условиях статического нагружения. Сплав ВТ6 имеет многомасштабную дефектно-фазовую структуру. Настоящая работа посвящена изучению дефектной структуры двухфазного титанового сплава ВТ6, формирующейся вблизи зоны разрушения на двух структурно-масштабных уровнях деформации.

Материал и методы исследования. Титан существует в двух модификациях: высокотемпературной, обладающей ОЦК кристаллической решеткой (β -фаза), которая при понижении температуры до 882,5° С превращается в низкотемпературную модификацию (α -фазу) имеющую ГПУ решетку. Исследованный сплав ВТ-6 имеет следующий состав: Ti – 6 вес. %Al – 4 вес.%V. Ванадий является β -стабилизирующим компонентом. Однако, концентрация ванадия в сплаве ВТ-6 меньше критической, поэтому сплав при комнатной температуре содержит лишь 17 вес.% β -фазы и 83 вес% α -фазы. Фазовый состав сплава был определен двумя методами: рентгеноструктурным и электронномикроскопическим, которые дали близкие результаты. Изучение дефектной структуры проводилось с использованием методов оптической и дифракционной электронной микроскопии; Для

механических испытаний использовались стандартные образцы размерами $(3 \times 3 \times 6)$ мм³. Образец подвергали деформированию (одноосное сжатие при комнатной температуре со скоростью $0,02$ мин⁻¹), в результате которого происходило разрушение материала.

Результаты. Исследование эволюции субструктуры сплава ВТ6 при статическом нагружении [1] показало, что с началом пластической деформации происходит поляризация дислокационной структуры. При степенях деформации, больших $0,2$, процессы поляризации дислокационной структуры активизируются, что приводит к формированию в образце субструктуры, известной в литературе [2] как субструктура с непрерывными разориентировками. Затем в этой субструктуре появляются деформационные субграницы. В результате в материале образуется новый тип субструктуры – это субструктура с непрерывными и дискретными разориентировками. При дальнейшем деформировании она эволюционирует во фрагментированную субструктуру.

На рис. 1 представлен микроснимок дефектной структуры вблизи зоны разрушения, на котором видны две подсистемы изгибных экстинкционных контуров. Крупномасштабная подсистема экстинкционных контуров свидетельствует о накоплении избыточной плотности дислокаций и создании полей дальнедействующих напряжений в масштабе колонии. Как правило, это сравнительно широкие контуры (например, у А на рис. 1а).

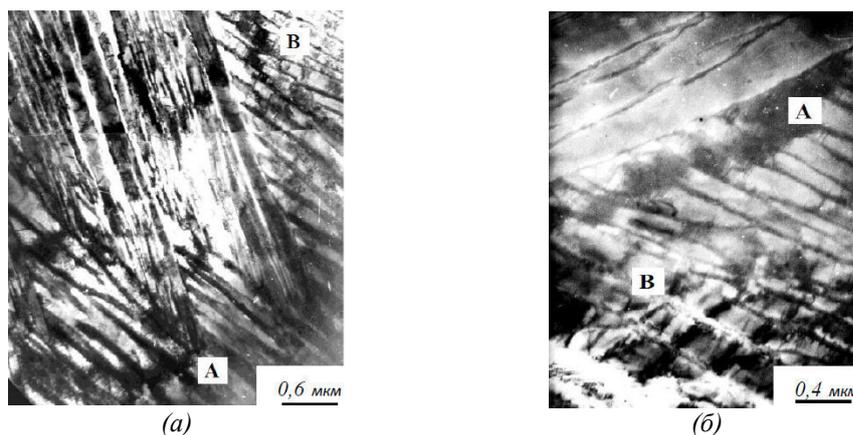


Рис.1 Картина экстинкционных контуров вблизи зоны разрушения сплава ВТ6

Их источниками чаще всего являются острые стыки колоний или их границы. В первом случае контуры замкнуты (рис.1а, у А) и при повороте фольги в электронном микроскопе, когда происходит смещение экстинкционного контура, острый стык колоний является «точкой закрепления» контура. Во втором случае(рис.1б, у А), контуры локализованы вдоль границы стыкующихся колоний и, как правило, обнаруживаются в той из них, в которой ламели расположены под большими углами к границе колонии (рис. 1б у А). При повороте фольги в микроскопе такие контуры обычно смещаются параллельно границе стыкующихся колоний. Такая картина контуров, в частности, может свидетельствовать об изгибах достаточно больших объемов колоний, в результате закономерным образом распределенного в масштабах колонии заторможенного границами ламелей сдвига.

В ламелях наблюдается своя подсистема изгибных экстинкционных контуров - узкие контуры (рис. 1б у В), не выходящие за пределы ламели, то есть контур начинается на одной границе ламели, а заканчивается на другой. Подсистема «ламельных» контуров представлена двумя их видами: контуры, в

которых наблюдаются дислокации и контуры «бездислокационные». Появление первого типа «ламельных» контуров, естественно, обусловлено накоплением избыточных дислокаций у тех границ ламелей (или их участков), организация сдвига через которые затруднена. В тех участках колоний, в которых сдвиги через границу ламели оказываются возможными и происходят, избыточная плотность дислокаций не накапливается и контуры экстинкции не наблюдаются. Наличие «бездислокационных» экстинкционных контуров свидетельствует об упругом изгибе ламелей.

Фрагментированная субструктура также формируется на двух масштабных уровнях. Наблюдается фрагментация колоний и ламелей. Соответственно, обнаруживаются крупномасштабные фрагменты колоний (рис.2а у В) и фрагменты в ламелях (рис.2б). В масштабах колонии формирование этого типа субструктуры связано с разрушением межфазных границ.

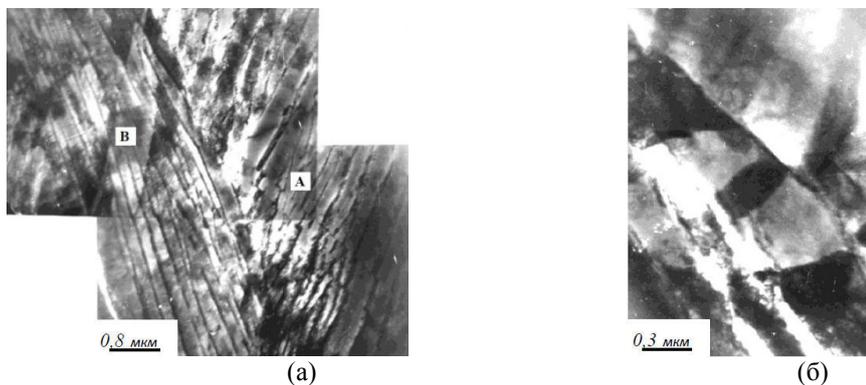


Рис. 2. Электронномикроскопическое изображение фрагментированной субструктуры на двух масштабных уровнях

Первые участки с фрагментированной субструктурой формируются в областях острых стыков колоний, с высокой плотностью избыточных дислокаций, а значит повышенных внутренних напряжений. Углы разориентации на границах фрагментов достигают нескольких градусов. Фрагментацию в масштабах колонии можно назвать мезофрагментацией.

Средние линейные размеры фрагментов на более мелком масштабном уровне соизмеримы с поперечными размерами α - и β - пластин. По сути, линейные размеры α - и β - фрагментов «навязываются» масштабами обеих структурных составляющих ламелей.

Выводы. Поляризация и фрагментация дислокационной структуры происходят на двух структурно-масштабных уровнях: колония и ламель. Фрагментированная субструктура, формирующаяся в ламелях, является последней в последовательности субструктурных превращений исследованного сплава ВТ6 перед разрушением.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Куницына Т. С., Теплякова Л.А. Эволюция дефектной структуры двухфазного титанового сплава при активном нагружении // Изв. вузов. Физика. - 2017, - Т. 60, - №5, - С. 93-98.
2. Козлов Э.В., Конева Н.А., Тришкина Л.И. Дислокационно-дисклинационные субструктуры, формирующиеся при большой пластической деформации ГЦК поликристаллов: эволюция и связь с напряжением течения // Изв. вузов. Физика. - 2014. - №2. - С. 38-44.

**ВЛИЯНИЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА СТРУКТУРУ НИКЕЛЕВОГО
СПЛАВА***^{1,2} А.В. Никоненко, ¹Н.А. Попова, ¹Е.Л. Никоненко

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. Н.А. Конева

¹Томский государственный архитектурно-строительный университет,

Россия, Томск, пл. Соляная, 2, 634003,

²Национальный исследовательский Томский государственный университет,

Россия, Томск, пр. Ленина, 36, 634050,

E-mail: vilatomsk@mail.ru**HIGH-TEMPERATURE EFFECT ON STRUCTURE OF NI-BASED ALLOY**^{1,2} A.V. Nikonenko, ¹N.A. Popova, ¹E.L. Nikonenko

Scientific Supervisor: Prof., Dr. N.A. Koneva

¹Tomsk State University of Architecture and Building, Russia, Tomsk, Soljanaja str. 2, 634003²National Research Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050,E-mail: vilatomsk@mail.ru

Abstract. The paper presents the transmission electron microscope investigations of the heat-resisting Ni–Al alloy structure modified by different elements, in particular, rhenium and ruthenium in the amount of ~4 at.%. The alloy is investigated after 1000°C annealing during 118 and 372 h. Investigations show that independent from the annealing duration, the main phases in the alloy are γ and γ' -phases. The increase in the annealing time results in the destruction of the cuboidal structure of material. The process of phase recrystallization occurring at a time, is accompanied by the formation of new phases, namely δ -phase (Al_3Ta_3Ru), Laves phase ($Ta_3Ni_2Cr_2Co$) and σ -phase $(Ni,Co,Al,Re)_x(Cr,Mo,Ta,W)_y$.

Введение. Одним из перспективных направлений в успешном развитии современной техники является создание сплавов, содержащих интерметаллидные фазы. Примером являются суперсплавы на основе смеси γ' - и γ -фаз, в которых γ -фаза представляет собой неупорядоченный ГЦК-твердый раствор на основе, в частности, никеля и алюминия, а γ' -фаза (в нашем случае фаза Ni_3Al) – упорядоченную фазу со сверхструктурой $L1_2$ [1]. В реальных суперсплавах на никелевой основе, состав которых является многокомпонентным, наряду с Ni и Al имеются атомы других элементов, таких как Ti, Cr, Co, Mo, W, Ta, Nb, Hf, Re [1, 2]. Легирование позволяет значительно повысить рабочую температуру суперсплавов и сопротивление ползучести.

Жаропрочные сплавы на основе никеля, как правило, обладают сложным химическим составом. Большое внимание уделяется сплавам на основе Ni-Al, легированным различными элементами, в частности, Re и Ru [2]. Установлено, что сплавы с различным содержанием Re и Ru являются

* Работа выполнена при поддержке государственного задания на проведение научных исследований по проекту № 3.8320.2017/БЧ

многофазными [1]. Число различных фаз зависит от концентрации рения и рутения. Оно, как правило, возрастает с ростом концентрации этих элементов.

Целью настоящей работы является исследование влияния высокотемпературного отжига на структурно-фазовое состояние жаропрочного сплава на основе Ni-Al.

Материал и методы исследования. Исследуемый сплав содержит такие элементы, как: Al, Co, а также Mo, Cr, W, Ta (их суммарное процентное содержание в сплаве около 7 ат. %), Re, Ru (~ 4 ат. %). Основу сплава составлял Ni. Сплав исследовался после отжига при 1000°C продолжительностью: 1) 118 часов; 2) 372 часа. Исследуемый сплав обладал монокристаллической структурой (ориентация [001]). Основными методами исследования являлись: просвечивающая дифракционная электронная микроскопия на тонких фольгах и рентгеноструктурный анализ.

Результаты и их обсуждение. Основными фазами, образующими сплав, являются две фазы: γ и γ' . Присутствующие в сплаве элементы неоднородно распределены между γ - и γ' -фазами: Ni – примерно одинаково; Co – в 2 раза больше в γ -фазе, чем в фазе γ' ; большая часть Cr и Mo сосредоточена также в γ -фазе. Этой фазе отдает преимущество в распределении и W. Наконец, Re и Ru практически полностью находится в γ -фазе. Такие элементы, как Al и Ta, напротив, сосредоточены в γ' -фазе. В ее упорядоченной структуре они занимают вершины куба, а Ni и Co – преимущественно в центре граней.

В состоянии после отжига при температуре 1000°C, 118 часов присутствуют практически только эти две фазы в соотношении γ' / γ , как 3 / 1 (см. рис.1). На рис.1а представлены электронно-микроскопические изображения γ' - и γ - фаз, наблюдаемые в сплаве. Четко прослеживается, что γ' -фаза представлена в сплаве достаточно правильными квазикубоидами. Иногда они вытянуты вдоль одного направления и имеют форму параллелепипедов. Небольшая часть Re находится в виде мелких частиц фазы $Al_6(Re,Ru)$ на дислокациях (рис.1б).

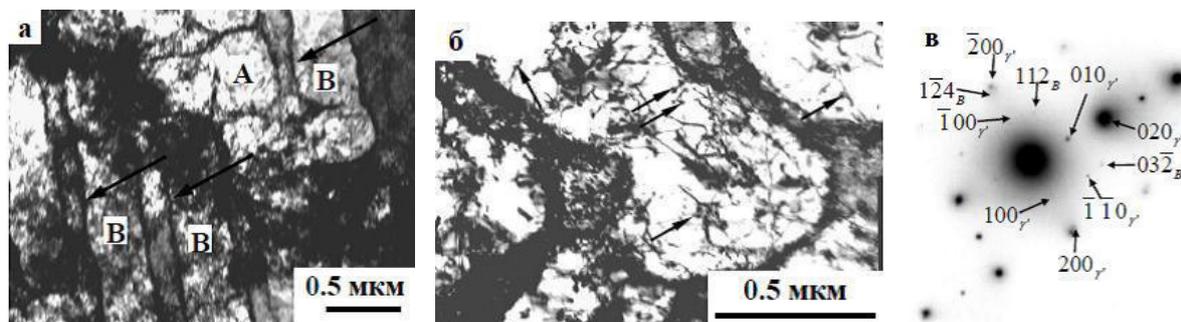


Рис.1. Тонкая структура сплава после отжига 1000°C, 118 часов. На (а) черными стрелками отмечены прослойки γ -фазы, «А» и «В» - квазикубоиды и квазипараллелепипеды γ' -фазы, соответственно.

Стрелками на (б) отмечены частицы $Al_6(Re,Ru)$ на дислокациях в γ' -фазе, на (в) – рефлексы, принадлежащие γ' -фазе, отмечены индексом « γ' », фазе $Al_6(Re,Ru)$ – индексом «В»

После более длительного высокотемпературного отжига (372 часа) в небольшом количестве появляются новые вторичные фазы, такие как σ -фаза и δ -фаза, фаза Лавеса (см. табл.1).

В ходе более продолжительного отжига происходит многофакторное изменение структуры материала. Возникающие в ходе отжига структуры разделяются на 4 типа.

Во-первых, это квазикубоиды (рис.1), во-вторых, полосовые анизотропные структуры (рис.2а), в-третьих, анизотропные структуры полосового типа с выделением σ -фазы (рис.2б) и, в-четвертых, бесструктурные участки с крупными двухфазными областями (рис.2в).

Таблица 1

Объемная доля фаз после различных термических обработок

Режим термообработки	Основные фазы (± 0.01)		Вторичные фазы (± 0.0005)			
	γ'	γ	Al ₆ Re	σ	δ	фаза Лавеса
отжиг 1000 ⁰ С, 118 ч.	0.72	0.25	0.03	нет	нет	нет
отжиг 1000 ⁰ С, 372 ч.	0.823	0.16	нет	0.008	0.008	0.001

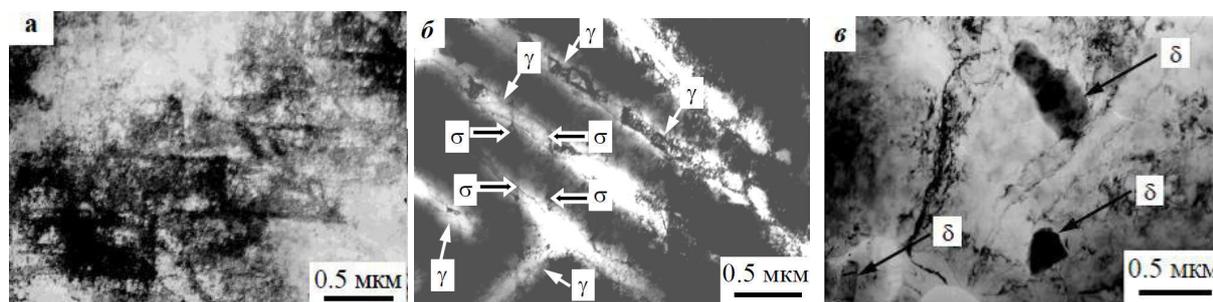


Рис.2. Электронно-микроскопическое изображение структуры сплава после отжига 1000⁰С, 372 часа: а – полосовая анизотропная структура; б – анизотропная структура с выделением σ -фазы (обозначена черно-белыми стрелками), белыми стрелками отмечена γ -фаза; в – бесструктурные участки γ -фазы с крупными частицами δ -фазы, внутри которых находятся выделения фазы Лавеса

Таким образом, установлено, что при отжиге происходит процесс разрушения кубоидной структуры материала. Этот процесс протекает в несколько стадий. Сначала округляются квазикубоиды γ' -фазы и размываются границы γ / γ' . Затем квазикубоиды превращаются в параллелепипеды. Степень дальнего порядка в γ' -фазе уменьшается, и в заключении остается лишь неупорядоченная γ -фаза. Так же проходит процесс фазовой перекристаллизации с образованием и выделением новых фаз. Это следующие фазы: δ -фаза (Al₃Ta₃Ru), фаза Лавеса (Ta₃Ni₂Cr₂Co) и σ -фаза (Ni,Co,Al,Re)_x(Cr,Mo,Ta,W)_y. Именно образование этих фаз забирает из γ' -фазы необходимые элементы для создания дальнего порядка. Этот процесс обусловлен высокой скалярной плотностью дислокаций, полями внутренних напряжений, фазовой перекристаллизацией, но особенно, и прежде всего, формированием σ -фазы. Этот последний процесс фазовой перекристаллизации наиболее существенным образом меняет свойства материала и влияет на его работоспособность.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Козлов Э.В., Смирнов А.Н., Никоненко Е.Л., Попова Н.А., Конева Н.А. Морфология фаз и фазовые превращения при термической обработке суперсплавов на основе Ni-Al-Cr и Ni-Al-Co. Масштабные и концентрационные эффекты. – М.: Инновационное машиностроение, 2016. – 175 с.
2. Nikonenko E.L., Popova N. A., Dement T. V, Koneva N. A. Structure and phase composition of Ni–Al–Cr alloy alloyed by rhenium and lanthanum // Russian Physics Journal. – 2017. - V. 60. - No. 2. – P. 231-235.

**ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРНО-ФАЗОВОГО СОСТОЯНИЯ МНОГОСЛОЙНЫХ ПОКРЫТИЙ
НА ОСНОВЕ Zr-Y-O**

А.В. Никоненко¹

Научный руководитель: доцент, к.ф.-м.н. М.В. Федорищева^{2,3}

¹ Национальный исследовательский Томский государственный университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050

² Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Россия, г. Томск, Академический 2/4, 634055

³ Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: fed_mv@mail.ru

**PECULIARITIES OF STRUCTURAL-PHASE STATE OF MULTI-LAYER COATINGS
BASED ON Zr-Y-O**

A.V. Nikonenko¹

Scientific Supervisor: Ass. Prof., Dr. M.V. Fedorischeva^{2,3}

¹ National Research Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str. 36

² Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

³ Institute of Strength Physics and Materials Science, SB RAS, Russia, Tomsk, av. Academicheskii, 2/4, 634055

E-mail: fed_mv@mail.ru

***Abstract.** Using high-resolution transmission electron microscopy it was established that the Zr-Y-O-based coating layers have a ZrO₂ phase in the tetragonal and monoclinic modifications in the initial state. When it is heated up to 900 °C, the ZrO₂ phase in the cubic modification appears in the layer of the coating. With an annealing time of 20 minutes, the grains are crushed to a size of about 15-20 nm. The microdiffraction pattern is modified, the number of reflexes of the tetragonal and monoclinic phases first increases, and then changes without systemic.*

Введение. Диоксид циркония – тугоплавкое соединение с преимущественно ионной межатомной связью, существующее в трех кристаллических модификациях – кубической, тетрагональной и моноклинной. Высокие прочность и трещиностойкость диоксида циркония обусловлены трансформационным переходом (полиморфным превращением) метастабильной тетрагональной модификации в стабильную моноклинную. Диоксид циркония имеет три устойчивых кристаллических структуры, зависящие от температуры: моноклинная (m) от температуры 1170°C, тетрагональная (t) от температуры 1170 °C – 2370 °C и кубическая (c) от температуры 2370 °C.

Керамические материалы с трансформационным упрочнением, которые широко применяются в инженерной практике как конструкционные материалы. Подавляющее количество таких керамических материалов разработано на основе диоксида циркония, частично стабилизированного в тетрагональной фазе [1-4]. Тетрагональная фаза способна испытывать мартенситный фазовый переход в моноклинную

фазу. Фазовый переход сопровождается развитием сдвиговых и объемных деформаций, обеспечивающих релаксацию напряжений и смыкание поверхностей трещин.

Данная работа посвящена изменению структурно - фазового состояния многослойных покрытий основе Si-Al-N / Zr-Y-O в слое ZrO₂ в процессе нагрева в режиме «in-situ» в колонне микроскопа, который сопровождается изменением зеренной структуры, межзеренных и межфазных границ.

Методы и материалы. В качестве подложки использовалась сталь марки ШХ15. Перед нанесением покрытий проводили ионную обработку поверхности подложки ионами Ti для лучшей адгезии с покрытием. Покрытия наносили на вакуумной установке типа «КВАНТ», которая оснащена двум магнетронами с кремний-алюминиевой и цирконий-иттриевой мишенями и вакуумно-дуговым источником с титановым катодом.

Проводили исследование методом электронной микроскопии в вакуумной камере при температуре 900°C (ПЭМ Jeol 2100). Температуру выдержки варьировали от 20 минут – 120 минут, при каждой из этих температур проводили съемку.

Результаты. Установлено, что основными фазами в слое на основе Zr-Y-O являются фазы ZrO₂ в моноклинной и тетрагональной модификациях. На рисунке 1,а приведено светлопольное изображение участка фольги и микродифракционная картина покрытия на основе Zr-Y-O с участка 3 в исходном состоянии. На схеме индицирования видно, что на этом участке присутствуют фазы ZrO₂ в моноклинной и тетрагональной модификации.

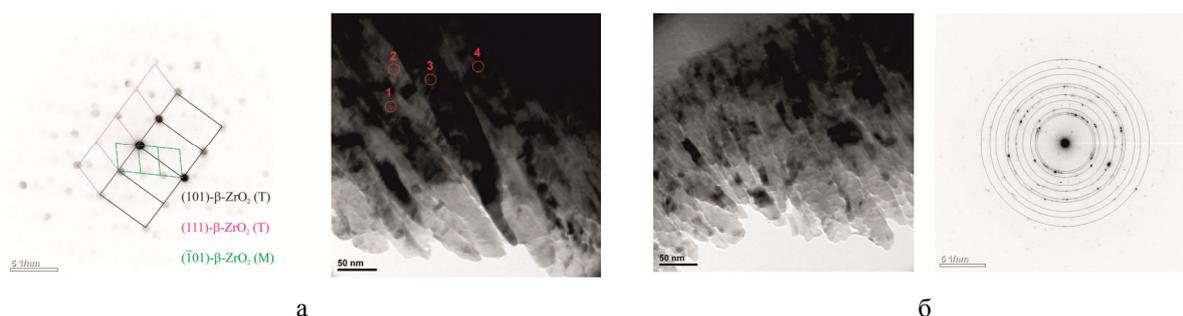


Рис. 1. Электронно-микроскопическое изображение многослойных покрытий на основе Zr-Y-O в исходном состоянии (а); при отжиге 900С в течение 20 минут (б): светлопольные изображения поперечного сечения; микродифракционные картины и схемы ее индицирования

Интересно отметить, что после отжига 900 С при времени отжига 20 минут точечная микродифракция модифицируется в кольцевую. На рис. 1,б приведено светлопольное изображение покрытия на основе Zr-Y-O/ Si-Al-N, микродифракционная картина и схема ее индицирования. Из схемы индицирования видно, что в покрытии присутствуют фазы ZrO₂ в тетрагональной и моноклинной модификации. Кроме того появляется фаза ZrO₂ в кубической модификации с параметрами кристаллической решетки $a=5,09\text{Å}$.

В светлопольном изображении (рис. 2, а) хорошо видны изгибные экстинкционные контуры в большом зерне (отмечено стрелками), что свидетельствует о наличии внутренних упругих напряжений в зернах покрытия. При нагреве образца в колонне микроскопа предположительно происходит мартенситный фазовый переход тетрагональной фазы в моноклинную и, под действием упругих напряжений, изгибные экстинкционные контуры видоизменяются. Это происходит потому, что объем кристаллической решетки моноклинной фазы на 4% больше, чем тетрагональной. Картина изгибных

экстинкционных контуров вновь изменяется при охлаждении в колонне микроскопа, т.е. снова возникают внутренние упругие напряжения на новых межфазных границах между тетрагональной и моноклинной фазами.

Интересно отметить, что при температуре 900°C происходит измельчение размера зерна в покрытии, мартенситный фазовый переход сопровождается измельчением размера зерна в слое покрытия. Межзеренные границы при этом видоизменяются, общая протяженность их увеличивается, как показано на рис. 2, г, д, е, форма зерен меняется, в исходных столбчатых зернах возникают поперечные границы. Другими словами, идет процесс фрагментации зерен. В слое покрытия после охлаждения структура и форма зерен существенно не изменяется.

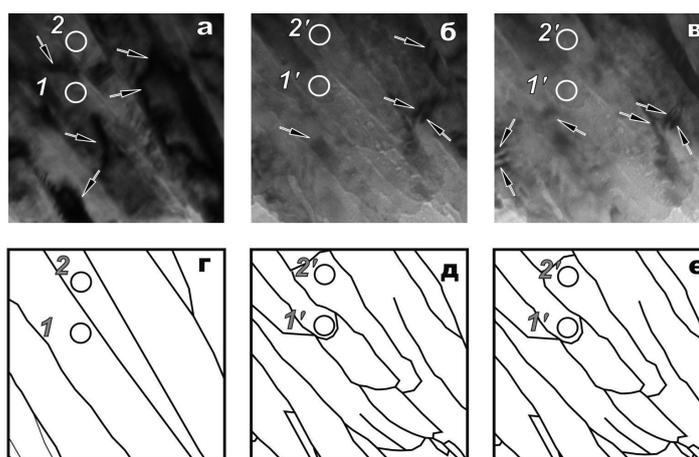


Рис.2. Электронно-микроскопическое изображение и схемы зеренной структуры покрытия на основе Zr-Y-O: исходное состояние (а, г); при температуре 900 °С (б, д); после охлаждения в колонне микроскопа (в, е)

Выводы. Таким образом, методом просвечивающей высокотемпературной электронной микроскопии высокого разрешения установлено, что слои покрытия на основе Zr-Y-O имеют в своем составе кристаллическую фазу ZrO_2 в двух модификациях тетрагональной и моноклинной в исходном состоянии. При нагреве до 900°C уже при времени выдержки 20 минут в составе слоя появляется фаза ZrO_2 в кубической модификации. При нагреве в колонне микроскопа образца до 900 С в режиме «in-situ» уже при выдержке 20 минут появляется фаза ZrO_2 в кубической модификации, межзеренные границы и, соответственно, форма зерен видоизменяются, общая протяженность границ увеличивается. В исходных столбчатых зернах образуются поперечные границы, т.е. происходит фрагментации зерен.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Garvie C. Ceramic Steel / C. Garvie, R. H. Hannink R. T. Pascoe // Nature (London). – 1975. – Vol. 258, № 5537. – P. 703–704.
2. Masaki T. Mechanical properties of Y_2O_3 – stabilized tetragonal ZrO_2 polycrystals after aging at high temperature // J. Am. Ceram. Soc. – 1986. – Vol. 69, № 7. – P. 519–522.
3. Microstructural Changes during Isothermal Aging of a Calcia Partially Stabilized Zirconia Alloy / H. J. Hannink [et al.] // J. Am. Ceram. Soc., Columbus. – 1981. – Vol. 3, № 2. – P. 116–136.
4. Лякишев Н.П. Диаграммы состояния двоинных систем: Справочник / Н.П. Лякишев. – М.: Машиностроение, 1999. – Т. 3, кн. 1. – 872 с

**КОНЦЕНТРАЦИЯ ЛЁГКИХ ИОНОВ И ПОЛЯРНЫЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ПРОВОДИМОСТИ
ВОЗДУХА В РАЗЛИЧНЫХ МЕТЕОРОЛОГИЧЕСКИХ УСЛОВИЯХ**М.В. Оглезнева¹Научный руководитель: К.Н. Пустовалов²¹Национальный исследовательский Томский государственный университет,² Института мониторинга климатических и экологических систем СО РАН

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050

E-mail: <mailto:ivanov@tpu.ru> Oglezneva.m@yandex.ru**BIOSCOMPOSITES FOR BONE TISSUE REGENERATION**M.V. Oglezneva¹Scientific Supervisor: K.N. Pustovalov²¹National Research Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050² Institute of Monitoring of Climatic and Ecological Systems SB RAS

E-mail: Oglezneva.m@yandex.ru

***Abstract.** Research of atmospheric electricity was conducted under the influence by meteorological conditions. The unipolar coefficient ranged from ~ 1 to 75. Relatively high negative values of the electric field and repeated decrease in concentrations of light ions were observed in the near-polar hours.*

Введение. Из всех компонентов атмосферного воздуха остаётся слабо изученным ионный состав, к которому обычно причисляют газовые ионы (лёгкие ионы), а также его изменение под влиянием различных метеорологических условий [1]. Исследование содержания лёгких ионов и их изменения во времени и пространстве под влиянием различных природных факторов необходимо для лучшего понимания электрических процессов в приземном слое, являющихся важным звеном Глобальной электрической цепи.

Цель: исследовать изменчивость концентраций электрических проводимостей в приземном слое атмосферы в различных метеорологических ситуациях.

Аппаратура и методы исследования. Для решения поставленных целей была использована аппаратура, позволяющая измерять атмосферно-электрические и метеорологические величины с высоким временным разрешением и в режиме непрерывного мониторинга. В ходе исследования осуществлялась регистрация содержания лёгких ионов, полярных электрических проводимостей и градиента потенциала электрического поля, а также температуры воздуха, влажности, атмосферного давления и характеристик ветра эпизодически с 2014 по 2016 гг. на геофизической обсерватории ИМКЭС СО РАН с помощью автоматизированной метеорологической информационно-измерительной системы (АМИИС). Схема расположения измерительного оборудования изображена на рис 1а. Для регистрации содержания лёгких ионов было использовано счетчик «Sapphire -3М» (См рис 1б,1в), изготовлен Центром НТТМ КГТУ им. А.Н. Туполева. Прибор измеряет концентрацию ионов в диапазоне от $2 \cdot 10^2$ до $1 \cdot 10^6$ см⁻³, с подвижностью не менее 0,4 см²/(В·с). Рабочие условия применения ограничены температурой от 15 до 25 °С и относительной влажностью воздуха – от 30 до 70%. Полярные

электрические проводимости воздуха измерялись прибором «Электропроводность-2». Измерение величины напряженности электрического поля осуществлялось флюксометрами «Поле-2» и «CS110». Атмосферное давление измерялось автоматическим датчиком «Motorola MPX4115AP», а температура воздуха и относительная влажность – «Vaisala HMP-45D». Скорость и направление ветра фиксировались с помощью анеморумбометра «М-63М».

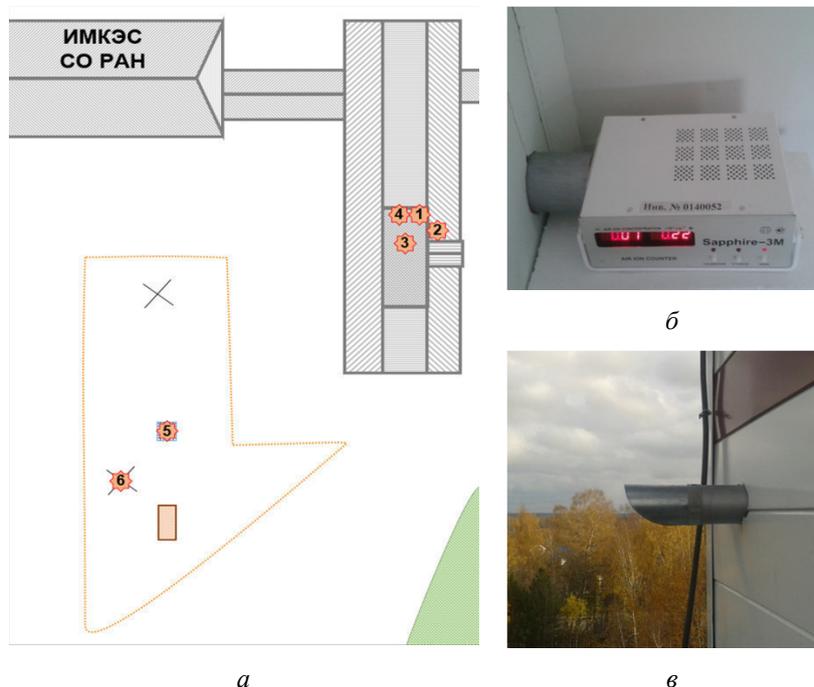


Рис. 1 –Схема расположения приборов (а) и условия размещения установки для измерения концентрации легких ионов (б – счётчик лёгких ионов «Сапфир-3М», в – воздухозаборник)

На рисунке: 1а: 1 – счётчик лёгких ионов «Сапфир-3М»; 2 – измеритель электропроводности воздуха «Электропроводность-2»; 3– датчики температуры, влажности, давления флюксометр «CS110»; 4 – анеморумбометр «М-63М»; 5 – флюксометр «Поле-2»; 6– ультразвуковая метеостанция «АМК-03

Измерение метеорологических величин, электрической проводимости и электрического поля осуществлялась с временным разрешением 30 с, а концентрации легких ионов – 1-4 с. Для сопоставления значений измеряемых величин были рассчитаны их среднeminутные значения.

Первые результаты. Проведен анализ согласованных изменений атмосферно-электрических и метеорологических величин для некоторых метеорологических ситуациях лимитируемых рабочими условиями счетчика «Сапфир-3М». Для примера, детально рассмотрим метеорологическую ситуацию с 8 по 10 июня 2016 г (рис 2). В эти дни над пунктом измерения установилась малооблачная погода, с сильной изменчивостью метеорологических величин. Облачность представлена перистыми и кучевыми облаками. В начале периода отношение концентраций положительных к отрицательным – коэффициент униполярности достигал более 75. Предположительно связано с прохождением кучевых облаков различной мощности. В середине периода фиксировалось падение положительных ионов и их незначительное превышение над отрицательными, наблюдавшееся на фоне уменьшения балла нижней облачности. Присутствие облачности верхнего яруса подтверждалось, таким явлением, как гало. В конце

отмечалось непродолжительное повышение коэффициента униполярности до ~ 30 . Относительно высокие значения электрического поля в полуденные часы и резкое падение концентрации положительных ионов, по-видимому, связано с интенсивным турбулентным перемешиванием и образованием слоя взвешенного аэрозоля, нижняя часть которого, заряжена отрицательно [1].

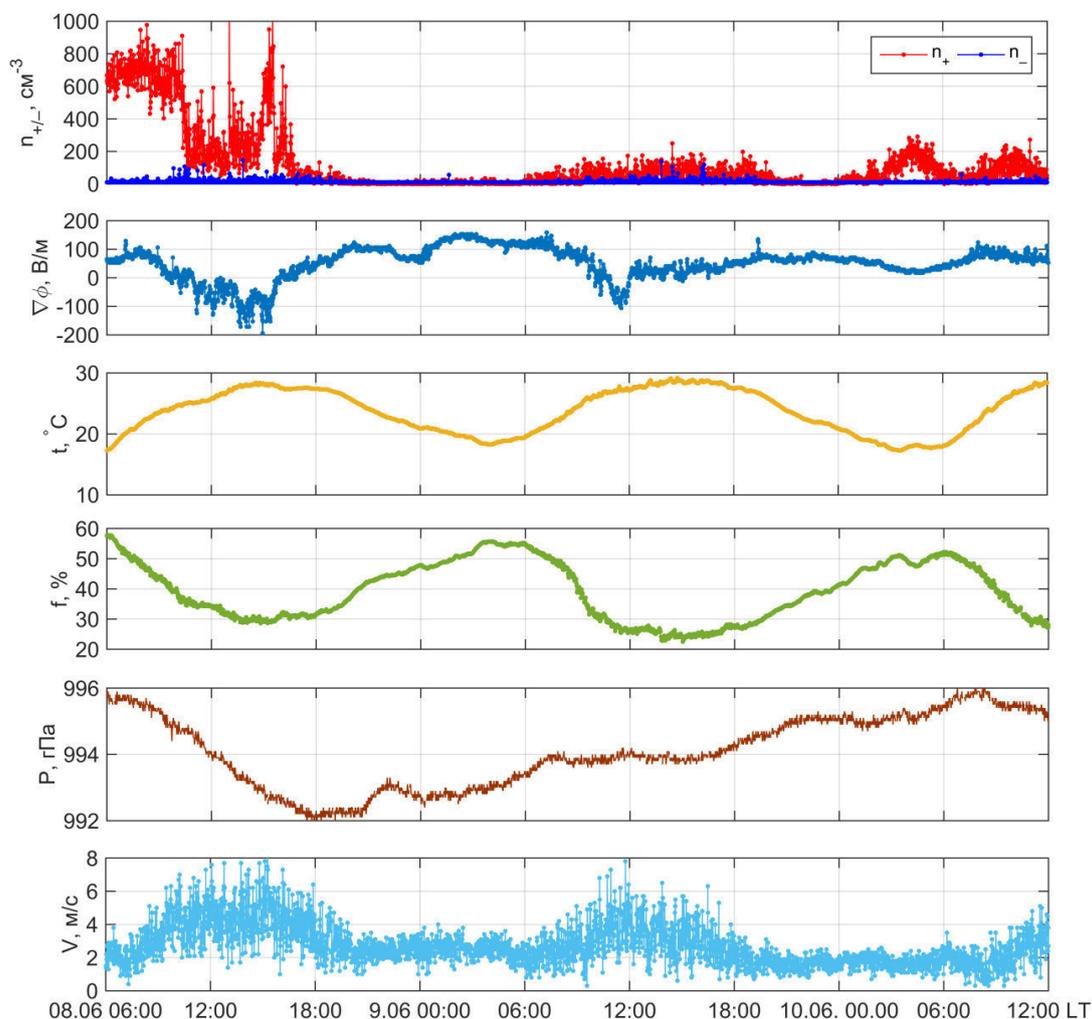


Рис. 2. Вариации концентрации положительных и отрицательных ионов ($n_{+/-}$), градиент потенциала электрического поля ($\nabla\phi$), температуры воздуха (t), относительная влажность (f), атмосферное давление (P) и скорость ветра (V) за период с 8 по 10 июня 2016 г.

Заключение. В ходе проведенных исследований отмечена сильная изменчивость атмосферно-электрических величин под влиянием метеорологических условий, даже при отсутствии осадкодающей облачности. В течении исследуемых событий коэффициент униполярности изменялся от ~ 1 до 75. В околополуденные часы отмечены относительно высокие отрицательные значения $\nabla\phi$ и многократное падение концентраций легких ионов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Смирнов В.В. Ионизация в тропосфере. – СПб.: Гидрометеиздат, 1992. – 309 с.

**ОСОБЕННОСТИ РАЗВИТИЯ ТЕРМОУПРУГИХ МАРТЕНСИТНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ ПОД
НАГРУЗКОЙ В [110]-МОНОКРИСТАЛЛАХ СПЛАВА $Ni_{51}Fe_{18}Ga_{27}Co_4$**

К.С. Осипович

Научный руководитель: д.ф.-м.н. Е.Ю. Панченко, профессор, д.ф.-м.н. Ю.И. Чумляков

Национальный исследовательский Томский государственный университет

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050

E-mail: osipovich_k@mail.ru

**STRESS-INDUCED MARTENSITIC TRANSFORMATION IN [110]-ORIENTED $Ni_{51}Fe_{18}Ga_{27}Co_4$
SINGLE CRYSTALS**

K.S. Osipovich

Scientific Supervisor: Assistant professors, Doctor of Physical and Mathematical Sciences E.Y. Panchenko,

Professor, Doctor of Physical and Mathematical Sciences Y.I. Chumlyakov

National Research Tomsk State University

Lenina Str., 36, Tomsk, Russia, 634050

E-mail: osipovich_k@mail.ru

Abstract. *In the present study, we investigated the stress-induced thermoelastic martensitic transformations in $Ni_{51}Fe_{18}Ga_{27}Co_4$ single crystals oriented along the [110]-direction. It was shown that high-temperature annealing at a temperature higher than the order-disorder transition temperature affects of the stress-induced thermoelastic martensitic transformations due to a change in the structure of the high-temperature phase of $L2_1$ by $B2$, the dissolution of the γ -phase. The isobaric experiments (shape memory effect) under external applied stress $\sigma = 100$ МПа have shown that for ($L2_1 + \gamma$)-crystals of the reversible deformation is $\varepsilon_{SME} = 2,1$ % with insignificant irreversibility and thermal hysteresis $\Delta T = (29 \pm 2)$ K. For $B2$ -crystals the reversible deformation $\varepsilon_{SME} = 4,5\%$, accompanied by the presence of an irreversible deformation to $\approx 1,6\%$ and the thermal hysteresis value $\Delta T = (61 \pm 2)$ K. The isothermal experiments (superelasticity) shown the energy dissipation at $T = 323$ K is $\Delta\sigma = (89 \pm 2)$ МПа and decreases with increasing test temperature in the $B2$ -crystals.*

Введение. Ферромагнитные материалы на основе сплава NiFeGaCo испытывают термоупругое $B2(L2_1)$ - $L1_0$ мартенситное превращение (МП), проявляют эффект памяти формы (ЭПФ) с величиной обратимой деформации до 10 % при растяжении и характеризуются циклической стабильностью высокотемпературной сверхэластичности (СЭ) [1]. Известно [1], что в монокристаллах, ориентированных вдоль [110]-направления, максимальное значение величины обратимой деформации превращения при проявлении ЭПФ и СЭ составляет $\varepsilon_{r0} = 6,2$ % при сжатии. Деформация превращения ε_{r0} связана с образованием сдвойникового варианта мартенсита ε_{CVP} и деформацией, обусловленной его последующим раздвойниванием под нагрузкой, ε_{detw} . Вклад раздвойнивания в величину ε_{r0} составляет почти 50 %: $\varepsilon_{CVP} \approx 3,0$ % и $\varepsilon_{detw} \approx 3,2$ %. Выяснение влияния вклада раздвойнивания на развитие термоупругих $B2(L2_1)$ - $L1_0$ МП в циклах охлаждения/нагрев и нагрузка/разгрузка является важным фактором для реализации всех потенциальных возможностей материала на основе сплава

NiFeGaCo. Поэтому цель данной работы заключается в исследовании особенностей развития термоупругих МП под нагрузкой в [110]-монокристаллах сплава $\text{Ni}_{51}\text{Fe}_{18}\text{Ga}_{27}\text{Co}_4$ (at. %).

Материалы и методы исследования. Монокристаллы $\text{Ni}_{51}\text{Fe}_{18}\text{Ga}_{27}\text{Co}_4$ были выращены по методу Бриджмена в атмосфере инертного газа. Ориентация образцов с размерами $6 \times 3 \times 3 \text{ мм}^3$ была определена на рентгеновском дифрактометре «Дрон-3» с использованием $\text{Fe}_{K\alpha}$ -излучения. Химический состав монокристаллов был подтвержден на растровом электронном микроскопе Philips SEM – 15 с микроанализатором EDAX ECON IV. Испытания проводили на установке ИМРС в циклах охлаждения/нагрева при постоянной внешней нагрузке и на установке Instron VHS 5969 со скоростью деформации 10^{-3} 1/с при постоянной температуре испытания.

Результаты. В работе [2] показано, что в исходном состоянии монокристаллы ферромагнитного сплава $\text{Ni}_{51}\text{Fe}_{18}\text{Ga}_{27}\text{Co}_4$ при $T = T_{\text{комн}}$ находятся в двухфазном состоянии ($L2_1 + \gamma$): в высокотемпературной фазе $L2_1$ -матрицы присутствует $(13,5 \pm 0,5) \%$ объемной доли вторичной γ -фазы, которая не испытывает МП. Полуколичественный элементный анализ показал, что вторичная фаза незначительно отличается по химическому составу от матрицы, обогащена Ni и обеднена Co (табл. 1), что согласуется с литературными данными [3]. Высокотемпературный отжиг при температуре $T = 1463 \text{ К}$, что выше температуры перехода порядок-беспорядок ($T = 1248 \text{ К}$) в данных сплавах [4], приводит к изменению структуры высокотемпературной фазы $L2_1$ на $B2$, растворению γ -фазы.

Таблица 1

Полуколичественный элементный анализ монокристаллов $\text{Ni}_{51}\text{Fe}_{18}\text{Ga}_{27}\text{Co}_4$

Фаза	Ni, at (%)	Fe, at (%)	Ga, at (%)	Co, at (%)
$L2_1$	$50,7 \pm 1,27$	$18,3 \pm 0,46$	$26,7 \pm 0,67$	$4,4 \pm 0,11$
γ	$50,04 \pm 1,25$	$21,03 \pm 0,53$	$23,99 \pm 0,6$	$4,94 \pm 0,12$
$B2$	$50,81 \pm 1,27$	$18,84 \pm 0,47$	$25,96 \pm 0,65$	$4,38 \pm 0,11$

Для исследования закономерности развития термоупругих МП в ($L2_1 + \gamma$)- и $B2$ -кристаллах проводили изобарические и изотермические испытания в циклах охлаждение/нагрев и нагрузка/разгрузка, соответственно (рис. 1).

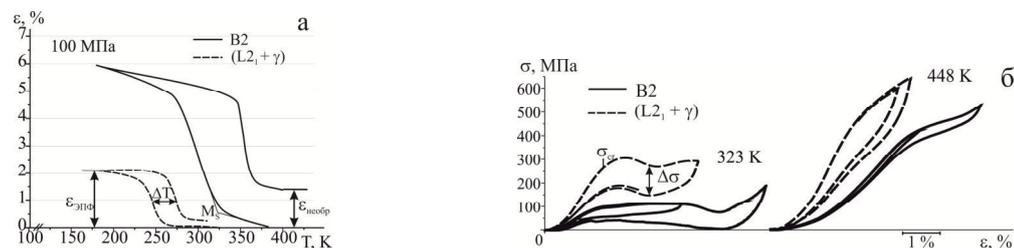


Рис. 1. Изобарические (а) и изотермические (б) испытания для [110]-монокристаллов сплава $\text{Ni}_{51}\text{Fe}_{18}\text{Ga}_{27}\text{Co}_4$ в исходном состоянии при деформации сжатием

Экспериментально установлено, что для $B2$ -кристаллов температура начала прямого МП M_s на 66 К больше, чем для монокристаллов $\text{Ni}_{51}\text{Fe}_{18}\text{Ga}_{27}\text{Co}_4$ в исходном состоянии (рис. 1а). Растворение вторичной γ -фазы оказывает влияние на рост величины обратимой деформации при ЭПФ. Так при

приложении одинаковых внешних напряжений величиной $\sigma_{\text{внеш}} = 100$ МПа для $(L2_1 + \gamma)$ -кристаллов величина ЭПФ составляет $\varepsilon_{\text{ЭПФ}} = 2,1$ %, что почти в 2 раза меньше, чем для $B2$ -кристаллов ($\varepsilon_{\text{ЭПФ}} = 4,5$ %). Рост обратимой деформации сопровождается увеличением величины термического гистерезиса ΔT , который характеризует рассеяние энергии при развитии МП в циклах охлаждения/нагрев, и необратимой деформации $\varepsilon_{\text{необ}}$. Изобарический цикл при $\sigma_{\text{внеш}} = 100$ МПа для $(L2_1 + \gamma)$ -кристаллов характеризуется величиной $\Delta T = (29 \pm 2)$ К и незначительной необратимой деформацией в отличие от $B2$ -кристаллов, в которых величина термического гистерезиса больше в 2 раза $\Delta T = (61 \pm 2)$ К и необратимая деформация составляет $\varepsilon_{\text{необ}} \approx (1,6 \pm 0,2)$ %. Неполная обратимость определяется вкладом пластической деформаций при развитии МП в циклах охлаждения/нагрев под нагрузкой, которое сопровождается раздвойникованием кристаллов мартенсита. Механический гистерезис $\Delta\sigma$, который характеризует рассеяние энергии при развитии МП в циклах нагрузка/разгрузка, в $(L2_1 + \gamma)$ -кристаллах сильно зависит от степени деформации и при постоянной температуре испытания $T = 323$ К составляет $\Delta\sigma = (121 \pm 2)$ МПа. В $B2$ -кристаллах при таких же условиях величина механического гистерезиса составляет $\Delta\sigma = (89 \pm 2)$ МПа, а с увеличением температуры испытания до $T = 448$ К происходит уменьшение механического гистерезиса до $\Delta\sigma = 42$ МПа. $[110]$ -монокристаллы вне зависимости от состояния характеризуются ростом критических напряжений σ_{cr} с увеличением температуры начала прямого МП в соответствии с соотношением Клапейрона–Клаузиуса [5]: для $(L2_1 + \gamma)$ -кристаллов σ_{cr} увеличивается с 273 до 453 МПа, а для $B2$ -кристаллов – с 93 до 409 МПа.

Заключение. В работе показано, что в $[110]$ -монокристаллах сплава $\text{Ni}_{51}\text{Fe}_{18}\text{Ga}_{27}\text{Co}_4$ закономерности развитие термоупругих МП определяются наличием вклада раздвойникования мартенсита под нагрузкой $\varepsilon_{\text{detw}}$ в деформацию превращения ε_{tr0} и микроструктурой высокотемпературной фазы ($(L2_1 + \gamma)$ - и $B2$ -структура). В $B2$ -кристаллов обратимые МП в циклах охлаждения-нагрев под сжимающей нагрузкой 100 МПа характеризуются высокими значениями величины ЭПФ для $\varepsilon_{\text{ЭПФ}} = 4,8$ %, величиной термического гистерезиса $\Delta T = (61 \pm 2)$ К и совершенной высокотемпературной сверхэластичностью при 448 К в отличие от $(L2_1 + \gamma)$ -кристаллов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 16-19-10250.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hamilton R.F. Mechanical response of NiFeGa alloys containing second-phase particles // Scripta Materialia. – 2007. – V. 55. – P.497–499.
2. Осипович К.С. Ориентационная зависимость термического и механического гистерезиса в монокристаллах сплава $\text{Ni}_{51}\text{Fe}_{27}\text{Ga}_{18}\text{Co}_4$ // Сборник научных трудов XIV Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых. – 2017. – Т. 1: Физика. – С. 261–263.
3. Imano Y. Martensitic and magnetic transformations of Ni–Ga–Fe–Co ferromagnetic shape memory alloys // Materials Science and Engineering A. – 2006. – V. 438–440. – P. 970–973.
4. Masdeu F. Magnetic-field-induced strain assisted by tensile stress in $L1_0$ martensite of Ni-Fe- Ga-Co alloy // Appl. Phys. Lett. – 2008. – V. 93. – P. 152503–152508.
5. Panchenko E. Yu. Two-way shape memory effect under multi-cycles in $[001]$ -oriented $\text{Ni}_{49}\text{Fe}_{18}\text{Ga}_{27}\text{Co}_6$ single crystal // Materials Science & Engineering A. – 2017. – V. 706. – P. 95–103.

**ПРИМЕНЕНИЕ ИК-ТЕРМОГРАФИИ В ИССЛЕДОВАНИИ ПЕРЕНОСА ГОРЯЩИХ
И ТЛЕЮЩИХ ЧАСТИЦ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ В РЕЗУЛЬТАТЕ ПРИРОДНЫХ ПОЖАРОВ**

В.В. Перминов, Д.П. Касымов, М.В. Агафонцев

Научный руководитель: канд. физ-мат. наук Д.П. Касымов

Национальный исследовательский Томский государственный университет

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050

E-mail: ya.vladperminov2013@yandex.ru

**IR-THERMOGRAPHY APPLICATION TO THE INVESTIGATION OF THE FIREBRAND
TRANSPORT WHILE WILDLAND-URBAN INTERFACE FIRES**

V.V. Perminov, D.P. Kasymov, M.V. Agafontsev

Scientific Supervisor: Cand. of Phys.-Math. Sciences D.P. Kasymov

Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050

E-mail: ya.vladperminov2013@yandex.ru

***Abstract.** Firebrand (pine bark and twigs) transport has been studied experimentally using a unique apparatus for generating burning and smoldering particles and method of IR-diagnostics. IR-diagnostics method was carried out using a thermal imager JADE J530SB with a spectral interval 2.5 - 2.7 μm , which allowed to estimate the temperature of firebrands, their movement speed, as well as the ignition conditions of the surface litter, modeled by the pine twigs.*

Введение. Исследование переноса горящих и тлеющих частиц в результате природных пожаров вызвана необходимостью точнее определить и охарактеризовать условия их воздействия на строения и напочвенный покров (тепловой поток от пламени и горящих частиц, образованных в результате горения растительности или строительных материалов) для различных типов природного-урбанизированных пожаров (например, плотность застройки, рельеф местности, растительные горючие материалы, ветер), а также уязвимость строений в зависимости от их формы и типов строительных материалов [1, 2]. В связи с этим необходимо знать условия воспламенения горючих материалов посредством горящих частиц, так как известно, что горящие частицы (как от растительности, так и строительных материалов) часто являются основным источником воспламенения в таких пожарах [3, 4].

В настоящей работе представлены результаты полунатурных экспериментов на уникальной установке по исследованию переноса горящих и тлеющих частиц различной формы и типа (кора сосны и веточки сосны) с помощью ИК-термографии [5–8].

Экспериментальная часть. Эксперимент проводился на опытной площадке Института оптики атмосферы СО РАН (рисунок 1). Для определения температуры генерируемых на установке частиц инфракрасная камера JADE J530SB с узкополосным оптическим фильтром, со спектральным интервалом 2,5–2,7 мкм, позволяющим измерять температуру в диапазоне 310–1500 °С. Матрица камеры имела размеры 320×240 пикселей. Съемка производилась с использованием объектива, имеющего фокусное расстояние $F=50$ мм, частота регистрации составляла 50 кадров/сек. Для данного оптического фильтра и

объектива применялись калибровки завода-изготовителя. Расстояние от выходной части генератора частиц до инфракрасной камеры составляло 8,7 м.



Рис. 1. Экспериментальная площадка перед проведением эксперимента. 1 – инфракрасная камера JADE J530SB, 2 – генератор горящих частиц, 3 – экспериментальная площадка с имитированным напочвенным покровом

Результаты. Использование тепловизора, в частности, позволило контролировать готовность установки к работе (определялся выход на температурный режим). На рисунке 2 представлена термограмма рабочей частиц установки.

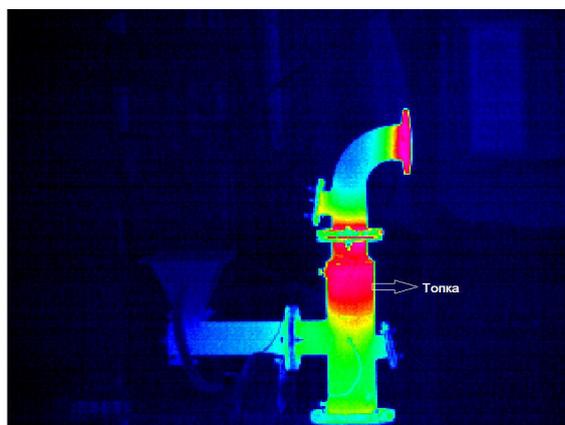


Рис. 2. Термограмма рабочей частиц установки

В результате использования специализированного программного обеспечения Altair по работе с тепловизором, получены тепловые параметры генерируемых горящих и тлеющих частиц. В частности, предварительные результаты показали, что максимальная температура частиц составила 570°C . Так же была проведена оценка скорости движения частиц, средняя величина которых составила 3,6 м/с. На рисунке 3 представлена термограмма эксперимента в момент активной фазы генерации частиц, а также график изменения температуры во времени в выбранной области, исключая воздействие горючей смеси на выходе из рабочей частиц установки, а также подстилающей поверхности, на которой располагалась площадка с растительным горючим материалом

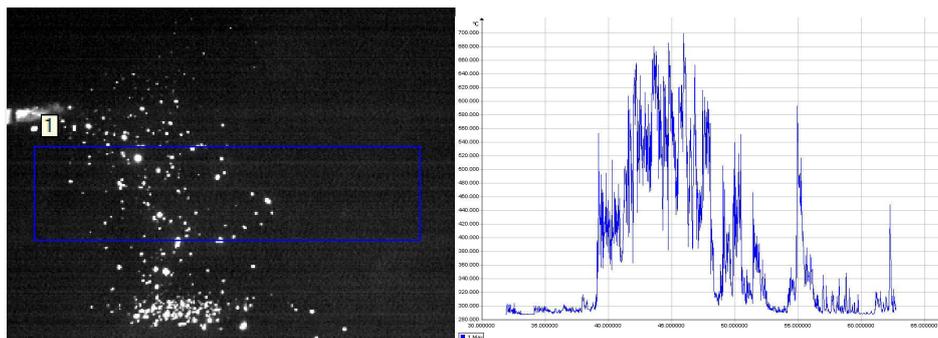


Рис.3. Термограмма развития переноса горящих и тлеющих частиц (слева) и график изменения температуры во времени в области 1 (справа)

Заключение. В ходе дальнейших исследований планируется оценка траекторий горящих частиц в зависимости от их геометрических размеров, скорости набегающего потока и внешних условий, а также их взаимодействие с напочвенным покровом и образцами строительных материалов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Mell W.E., Manzello S. L., Maranghides A., Butry D., and Rehm G.R. The wildland–urban interface fire problem – current approaches and research needs. *International Journal of Wildland Fire*. – 2010. – Vol. 19. – Pp. 238–251.
2. Manzello S. L., Cleary T. G., Shields J. R., Maranghides A., Mell W., and Yang J. C. Experimental investigation of firebrands: Generation and ignition of fuel beds. *Fire Safety Journal*. – 2008. – Vol. 43. – No. 3. – Pp. 226–233.
3. Tse S.D. Fernandez-Pello A. and C. On the flight paths of metal particles and embers generated by power lines in high winds - a potential source of wildland fires. *Fire Safety Journal*. – 1998. – Vol. 30. – No. 4. – Pp. 333–356.
4. Albini F. A. Transport of Firebrands by Line Thermals, *Combust. Sci. Technol.* – 1983. – Vol. 32. – No. 5–6. – Pp. 277–288.
5. Касымов Д.П., Перминов В.В., Рейно В.В., Фильков А.И., Лобода Е.Л. Экспериментальная установка по генерации горящих частиц для исследования распространения природного пожара // *Известия ВУЗов. Физика*. – 2017. – Т. 60. № 12/2. – С. 107–112.
6. Filkov A., Prohanov S., Kasymov D. et al. Investigation of firebrand production during prescribed fires conducted in a pine forest. *Proceedings of the Combustion Institute*. – 2017. – Vol. 36. – No. 2. – С. 3263–3270.
7. Filkov A., Kasymov D., Zima V., Matvienko O. Experimental investigation of surface litter ignition by bark firebrands // *AIP Conference Proceedings 2. Сер. "Advanced Materials in Technology and Construction, AMTC 2015: Proceedings of the II All-Russian Scientific Conference of Young Scientists "Advanced Materials in Technology and Construction"*. – 2016. – С. 060004.
8. Kasymov D.P., Filkov A.I., Baydarov D.A., Sharypov O.V. Interaction of smoldering branches and pine bark firebrands with fuel bed at different ambient conditions // *Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering 22. Сер. "22nd International Symposium on Atmospheric and Ocean Optics: Atmospheric Physics"*. – 2016. – С. 100356H.

**О СВЕРХЗВУКОВОМ ТЕЧЕНИИ ГАЗА В ПЛОСКОМ КАНАЛЕ С ОСЦИЛЛИРУЮЩЕЙ
ВЕРХНЕЙ СТЕНКОЙ***

Е.В. Перчаткина

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н., Л.Л. Миньков
Национальный исследовательский Томский государственный университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050
E-mail: perchatkinae@mail.ru

**ON THE PROBLEM OF SUPERSONIC GAS FLOW IN TWO-DIMENSIONAL CHANNEL WITH
THE OSCILLATING UPPER WALL**

E.V. Perchatkina

Scientific Supervisor: Prof., Dr. L.L. Minkov
Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050
E-mail: perchatkinae@mail.ru

***Abstract.** In the present paper we solve the problem of supersonic gas flow in two-dimensional channel with the moving upper wall making oscillations according to the harmonic law. In order to get a numerical solution for gas dynamics equations we have implemented a difference scheme with space and time approximation of the first order and one with space approximation of the second order. Depending on a type of harmonic law and initial gas inflow conditions, the peculiarities of angle-shock wave propagation in moving curvilinear domains have been investigated. It has been determined that the increase of oscillation amplitude causes the increase of shock wave intensity. It has been shown that under particular oscillation amplitude the moving wall has practically no effect on the flow within the domain.*

Введение. Подробное изучение характеристик течения при сверхзвуковых скоростях в каналах сложной формы, в том числе и в соплах, является довольно актуальной темой в наше время. Необходимым также является детальное исследование поведения характеристик газа при его течении в областях с изменяющейся во времени геометрией, к примеру, в соплах с регулируемым выходным сечением, в поворотных соплах с возможностью изменения вектора тяги и т.д. Более того, при полете ракет наблюдается возникновение различных вибраций корпуса и его составных частей: от механических вибраций, вызванных запуском ракетных двигателей в самом начале, до вибраций, возникающих во время полета при сверхзвуковых скоростях вследствие аэродинамических нагрузок (так называемое явление флаттера) [1]. Целью данной работы является получение численного решения задачи о сверхзвуковом течении газа в плоском канале с подвижной непроницаемой для газа верхней границей, совершающей колебания по гармоническому закону. Для этого реализованы две разностные схемы: первого порядка точности по пространственным и временной переменным [2] и второго порядка точности по пространству [3].

Постановка задачи. Рассматриваемая область состоит из верхней BC и нижней AD непроницаемых для газа границ (твердых стенок), с открытыми для течения газа левой и правой границами, рисунок 1. Газ втекает в область через левую границу AB со сверхзвуковой скоростью,

направленной под углом α , и вытекает из области через правую границу CD . Граница BC совершает колебания вдоль вертикального направления по гармоническому закону $y = |DC| + A \frac{x}{|AD|} \sin(\omega t)$, при этом точка B остается неподвижной. Пусть высота области на входе и выходе в начальный момент времени равна $AB=DC=1$, длина области $AD=4$.

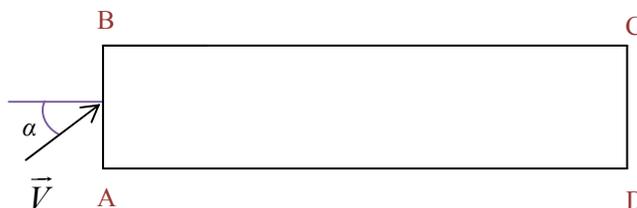


Рис. 1. Расчетная область

Течение газа описывается системой уравнений Эйлера в криволинейной системе координат (1).

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{U}}}{\partial \tau} + \frac{\partial \tilde{\mathbf{F}}}{\partial \xi} + \frac{\partial \tilde{\mathbf{G}}}{\partial \eta} = 0, \quad (1)$$

где

$$\tilde{\mathbf{U}} = \begin{pmatrix} \rho J \\ \rho J u \\ \rho J v \\ \rho J E \end{pmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{F}} = \begin{pmatrix} \rho(\alpha - \gamma) \\ \rho u(\alpha - \gamma) + p \cdot y_\eta \\ \rho v(\alpha - \gamma) - p \cdot x_\eta \\ \rho H(\alpha - \gamma) + p \cdot \gamma \end{pmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{G}} = \begin{pmatrix} \rho(\beta - \sigma) \\ \rho u(\beta - \sigma) - p \cdot y_\xi \\ \rho v(\beta - \sigma) + p \cdot x_\xi \\ \rho H(\beta - \sigma) + p \cdot \sigma \end{pmatrix},$$

u, v – составляющие вектора скорости V , направленные по осям x, y декартовой системы координат; ρ – плотность; p – давление; H – энтальпия, $E + \frac{p}{\rho}$; E – полная энергия, $\frac{1}{k-1} \cdot \frac{p}{\rho} + \frac{u^2 + v^2}{2}$; k – отношение теплоемкостей, 1,4; $J = x_\xi \cdot y_\eta - x_\eta \cdot y_\xi$ – якобиан преобразования; $\alpha = u \cdot y_\eta - v \cdot x_\eta$; $\gamma = x_\tau \cdot y_\eta - y_\tau \cdot x_\eta$; $\beta = v \cdot x_\xi - u \cdot y_\xi$; $\sigma = y_\tau \cdot x_\xi - x_\tau \cdot y_\xi$.

Начальные и граничные условия на входе задаются в форме (2).

$$\rho=1; u=2; v=0,5; P=1 \quad (2)$$

Если течение сверхзвуковое, то есть $u > c$, граничные условия на выходе не задаются. Если течение дозвуковое, т. е. $u < c$, то параметры состояния газа на правой границе вычисляются исходя из заданного давления окружающей среды.

Для получения решения данной задачи используется метод конечных (контрольных) объемов с нахождением потоков через грани по методу Ван Лира. В первом случае при решении используется разностная схема первого порядка точности по пространственным переменным и по времени (3).

$$\frac{\mathbf{U}_{i,j}^{n+1} - \mathbf{U}_{i,j}^n}{\Delta \tau} + \frac{\mathbf{F}_{i+1/2,j}^n - \mathbf{F}_{i-1/2,j}^n}{h_\xi} + \frac{\mathbf{G}_{i,j+1/2}^n - \mathbf{G}_{i,j-1/2}^n}{h_\eta} = 0 \quad (3)$$

где $\Delta \tau$ – шаг по времени; h_ξ – шаг в направлении оси ξ ; h_η – шаг в направлении оси η ; i, j – отвечают шагам по пространству в направлении ξ и η ; n – соответствует шагу по времени.

Во втором случае используется разностная схема Колгана [3], обладающая вторым порядком аппроксимации по пространственным переменным, согласно которой значения функции на гранях

вычислительных ячеек слева и справа соответственно, можно получить, используя следующие выражения (4).

$$\begin{cases} \mathbf{U}_{i+\frac{1}{2}}^l = \mathbf{U}_i + \frac{1}{2} \delta \mathbf{U}_i \\ \mathbf{U}_{i+\frac{1}{2}}^r = \mathbf{U}_{i+1} - \frac{1}{2} \delta \mathbf{U}_{i+1} \end{cases}, \quad (4)$$

где $\delta \mathbf{U}_i$ – значение приращения функции внутри ячейки, $\delta \mathbf{U}_i = \begin{cases} (\mathbf{U}_i - \mathbf{U}_{i-1}), & |\mathbf{U}_i - \mathbf{U}_{i-1}| < |\mathbf{U}_{i+1} - \mathbf{U}_i|; \\ (\mathbf{U}_{i+1} - \mathbf{U}_i), & |\mathbf{U}_i - \mathbf{U}_{i-1}| > |\mathbf{U}_{i+1} - \mathbf{U}_i|; \\ 0, & (\mathbf{U}_i - \mathbf{U}_{i-1})(\mathbf{U}_{i+1} - \mathbf{U}_i) \leq 0 \end{cases}$

Анализ результатов численного решения задачи. Результаты численного моделирования сверхзвукового течения газа в области с изменяющейся во времени геометрией были получены с помощью разностной сетке 200×50 и визуально представлялись в виде изолиний давления и чисел Маха.

Сравнение графиков, полученных при решении задачи с помощью разностных схем первого и второго порядка аппроксимации, показало, что при увеличении порядка точности контур косых скачков уплотнения и разрежения становится более отчетливым. Также визуализация результатов расчета для случая прямого втекания в область ($a = 0^\circ$) выявила, что подъем верхней стенки вызывает образование волны разрежения в начале области и, напротив, при движении стенки вниз – волну сжатия. Кроме того, при расчете ударных волн и волн сжатия с небольшими перепадами параметров на разрывах, предпочтительнее использовать схему второго порядка точности. Сравнение результатов позволяет прийти к заключению, что при увеличении амплитуды качания верхней стенки увеличивается и интенсивность образующихся волн разрежения, и волн сжатия.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках государственного задания No 9.9625.2017/8.9.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Димитриенко Ю.И., Захаров А.А., Абакумов А.С., Коряков М.Н., Сыздыков Е.К. Численное моделирование газовых потоков в каналах воздухозаборников на основе уравнений Навье-Стокса // Вестник Московского государственного технического университета им. Н.Э. Баумана. Серия: Естественные науки. 2011. № 4. С. 44-53.
2. Численное решение многомерных задач газовой динамики / С.К. Годунов [и др.]. – М.: Наука, 1976. – 400 с.
3. Миньков Л.Л., Шрагер Э.Р. Основные подходы к численному решению одномерных уравнений газовой динамики.: учеб. пособие. – Томск: STT, 2016. – 136 с.

АНТИФЕРРОМАГНИТНЫЕ ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ИЗОЛЯТОРЫ $MnBi_2Te_2Se_2$ И $VBi_2Te_2Se_2$ Е.К. Петров

Научный руководитель: доцент, к.ф.-м.н. Т.В. Меньщикова
Национальный исследовательский Томский государственный университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050
E-mail: eg901petrov@gmail.com

ANTIFERROMAGNETIC TOPOLOGICAL INSULATORS **$MnBi_2Te_2Se_2$ AND $VBi_2Te_2Se_2$** E.K. Petrov

Scientific Supervisor: Associate Prof., Ph.D T.V. Menshchikova
Tomsk State University,
Russia, Tomsk, Lenin avn., 36, 634050
E-mail: eg901petrov@gmail.com

***Abstract.** Present study is devoted to ab initio investigation of $MnBi_2Te_2Se_2$ and $VBi_2Te_2Se_2$ compounds. It is shown that these compounds have the electronic structure features typical for a topological insulator. However, these compounds are antiferromagnetically ordered phases. Such antiferromagnetic topological insulators (AFM TI) were predicted in 2010 by Mong et al., and these compounds turn out to satisfy all requirements to be AFM TIs.*

Введение. В течение последнего десятилетия в физике конденсированного состояния наблюдается значительный рост интереса к топологически нетривиальным материалам. Особенно актуальными в этой области становятся исследования, направленные на поиск материалов, которые могут стать основой электроники нового поколения. Ведется активное изучение материалов, в которых возможно наблюдение ряда крайне многообещающих физических эффектов, например, квантового аномального эффекта Холла [1]. Одним из таких классов топологически нетривиальных материалов являются топологические изоляторы (ТИ), которые обладают особой электронной структурой, возникающей в результате наличия сильного спин-орбитального взаимодействия.

В 2010 году Монг и др. предложили концепцию антиферромагнитного (АФМ) ТИ [2]: особой антиферромагнитно упорядоченной топологически нетривиальной фазы. В силу АФМ упорядочения трансляционная симметрия и симметрия обращения времени нарушается, но сохраняется их комбинация (произведение). Наличие АФМ упорядочения не приводит к значительным отличиям от фазы ТИ в объеме кристалла, однако приводит к ряду интересных эффектов на поверхности. На сегодняшний день в опубликованных работах упоминается только один кандидат на роль АФМ ТИ – $GdBiPt$ [3, 4].

Методы и объект исследования. В настоящей работе предложена группа соединений, обладающих описанными выше признаками АФМ ТИ – $MnBi_2Te_2Se_2$ и $VBi_2Te_2Se_2$. Проведено первопринципное исследование их кристаллической структуры, магнитного упорядочения и анизотропии, а также электронной структуры объема и поверхности этих соединений. Исследование проведено в рамках теории функционала электронной плотности методом проекционных плоских волн,

реализованным в программном пакете VASP. Для учета поведения сильно-локализованных 3d-состояний атомов Mn и V был использован GGA+U-подход.

Кристаллическая и магнитная структура. Результаты расчетов показывают, что $\text{MnBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$ и $\text{VBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$ кристаллизуются в ромбоэдрической кристаллической решетке (рис. 1, а) и характеризуются АФМ упорядочением, при этом ось квантования спина лежит в плоскости (0001) (рис. 1, б).

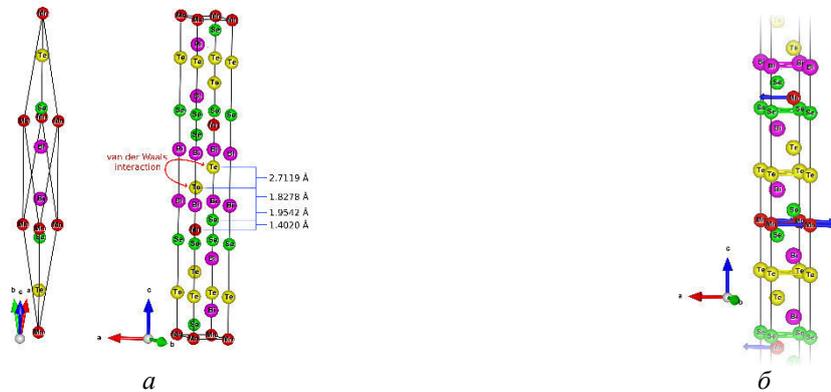


Рис. 1. (а) Кристаллическая решетка рассматриваемых соединений на примере $\text{MnBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$ в ромбоэдрическом (слева) и гексагональном (справа) базисах, а также значения межплоскостных расстояний; (б) магнитное упорядочение и направления магнитных моментов (синие стрелки) в рассматриваемых соединениях на примере $\text{MnBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$

Зонная структура объема и поверхности. На примере зонной структуры $\text{MnBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$ (рис. 2, а) видно, что в окрестности точки Γ орбитальный состав зон, образующих края энергетической щели, инвертирован, что является характерным признаком ТИ. Для того, чтобы убедиться, что энергетическая щель инвертирована именно за счет спин-орбитального взаимодействия, был проведен ряд расчетов при различных значениях константы спин-орбитального взаимодействия $\Lambda = \lambda/\lambda_0$ от 0 (спин-орбитальное взаимодействие не учтено) до 1 (учтено полностью) (рис. 2, б). Отчетливо видно, что при $\Lambda < 0.75$ энергетическая щель не инвертирована, при $\Lambda = 0.75$ она закрывается, а при $\Lambda > 0.75$ инвертирована. Группа соединений с ванадием демонстрирует качественно схожее поведение.

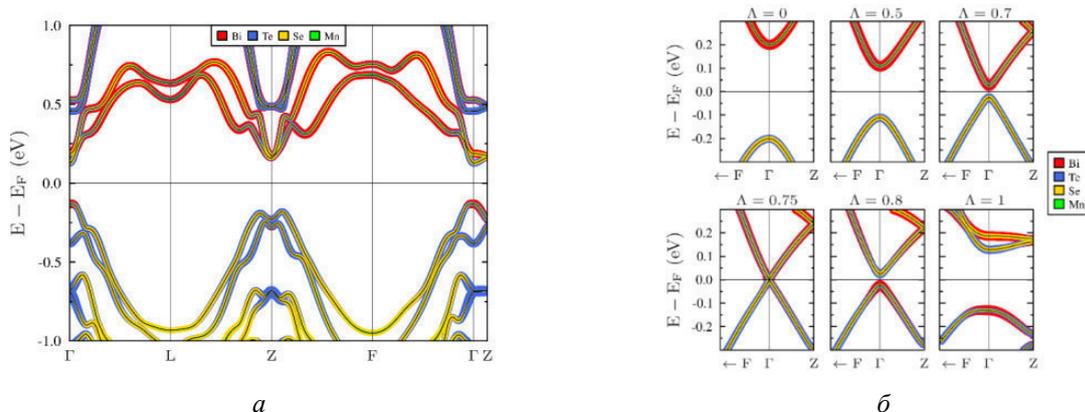


Рис. 2. (а) Зонная структура (черные линии) объема $\text{MnBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$ и орбитальный состав зон (цветные линии); (б) зонная структура и орбитальный состав $\text{MnBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$ в окрестности точки Γ при различных значениях Λ

Прямым следствием наличия инвертированной энергетической щели в объеме материала являются бесщелевые поверхностные состояния. В зонной структуре поверхности $\text{MnBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$ (рис. 3, а) отчетливо видно бесщелевое поверхностное состояние, обладающее характерной дисперсией, близкой к линейной. Наличие таких состояний типично для ТИ, однако поскольку рассматриваемое соединение обладает магнитным упорядочением, причем ось квантования спина лежит в плоскости (0001), точка Дирака сдвинута из точки $\bar{\Gamma}$. Схожая картина наблюдается и для $\text{VBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$ (рис. 3, б). Видно, что зонная структура поверхности имеет те же особенности. Исключение составляет смещение конуса Дирака из точки $\bar{\Gamma}$ – в случае $\text{VBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$ оно меньше, что вызвано меньшим значением величины магнитного момента на ионах ванадия по сравнению с ионами марганца.

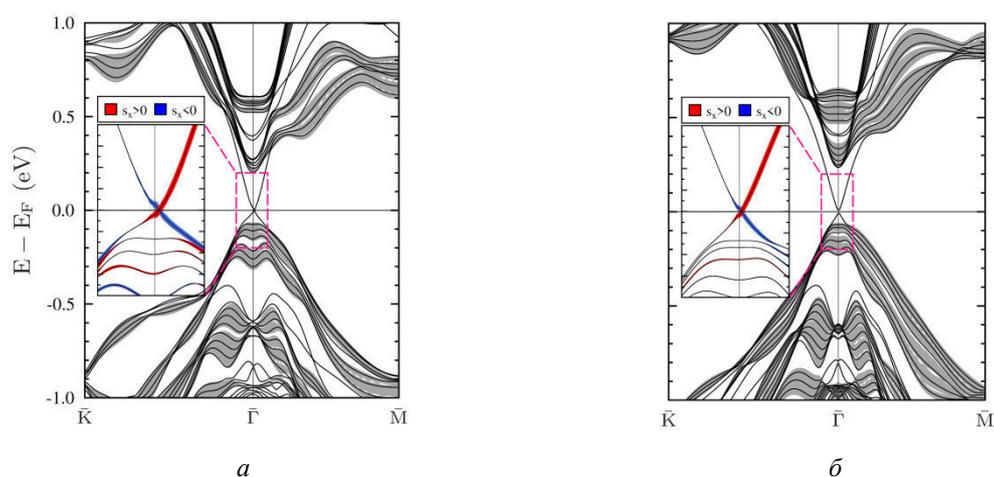


Рис. 3. Зонная структура поверхности $\text{MnBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$ (а) и $\text{VBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$ (б). Красными и синими линиями показана спиновая текстура бесщелевого поверхностного состояния

Выводы. Полученные результаты свидетельствуют о том, что рассмотренные соединения являются АФМ ТИ. Во-первых, в зонной структуре объема присутствует инвертированная энергетическая щель. Во-вторых, в зонной структуре поверхности имеется бесщелевое поверхностное состояние с дисперсией, близкой к линейной. При этом точка Дирака поверхностного бесщелевого состояния сдвинута из точки $\bar{\Gamma}$ в силу наличия in-plane намагниченности в системе. И, наконец, это поверхностное состояние обладает типичной для ТИ геликоидальной (хиральной) спиновой текстурой.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00728.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hasan M. Z., Kane C. L. Colloquium: Topological insulators // *Reviews of Modern Physics*. – 2010. – Vol. 82. – №. 4. – P. 3045.
2. Mong R. S. K., Essin A. M., Moore J. E. Antiferromagnetic topological insulators // *Physical Review B*. – 2010. – Vol. 81. – №. 24. – P. 245209.
3. Müller R. A. et al. Magnetic structure of GdBiPt: A candidate antiferromagnetic topological insulator // *Physical Review B*. – 2014. – Vol. 90. – №. 4. – P. 041109.
4. Li Z. et al. Electronic structure of the antiferromagnetic topological insulator candidate GdBiPt // *Physical Review B*. – 2015. – V. 91. – №. 23. – P. 235128.

ДЕГРАДАЦИЯ МЕТИЛЕНОВОГО ЗЕЛЕНОВОГО В ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКОМ РЕАКТОРЕ

А.Ю. Петрова, В.Р. Артюшин

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. О.Н. Чайковская
Национальный исследовательский Томский государственный университет,
Россия, г.Томск, пр. Ленина, 36, 634050
E-mail: petrovaayu@gmail.com

DEGRADATION OF METHYLENE GREEN IN PHOTOCATALYTIC REACTOR

A. Yu. Petrova, V. R. Artjyshin

Supervisor: Prof., Dr. O. N. Tchaikovskaya
National Research Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin Ave., 36, 634050
E-mail: petrovaayu@gmail.com

***Abstract.** Degradation of methylene green in photocatalytic reactor is studied. An array of data on the photochemical properties of methylene green when exposed to UV radiation in photoreactors was obtained. Based on the analysis of the results obtained, conclusions can be drawn about the relationship between the structure of pollutants, their initial concentration, oxidizer concentration, etc., with the efficiency of utilization, and schemes for photochemical processes was constructed. The conditions for the degradation of molecules in photoreactors were optimized. Kinetic models for predicting photodegradation of molecules was constructed.*

Введение. Решение проблемы очистки воды до сих пор остается одной из важнейших задач физики, химии и экологии [1, 2]. В связи с глобальными проблемами загрязнения и нехватки воды разработка новых эффективных концепций очистки воды является стратегической, фундаментальной задачей. При формировании эффективных каталитических и бактерицидных систем в качестве носителя активных компонентов перспективно использовать полипропиленовые микроволокнистые материалы (ПММ) [3-7]. Создание на основе ПММ фильтрующих материалов для очистки воды от различных видов загрязнителей возможно модифицированием их поверхности наноразмерными частицами [8].

Материалы и методы исследования. Поверхность образцов ПММ, содержащая наноструктурные катализаторы, до и после УФ-облучения исследована по ИК-спектрам, которые получены по стандартной методике на спектрометре *Nicolet-380*. Облучение производилось КгСl эксиплекской лампой с длиной волны излучения 222 нм. В качестве образцов использовались:

1. Исходный сухой ПММ;
2. ПММ в водном растворе метиленового зеленого (МЗ) (при концентрации $C=10^{-6}$ М);
3. ПММ в водном растворе МЗ после облучения КгСl эксиплекской лампой;
4. ПММ в воде;
5. ПММ в воде после облучения КгСl эксиплекской лампой;
6. ПММ в водном растворе МЗ ($C=10^{-5}$ М);
7. ПММ в водном растворе МЗ ($C=10^{-5}$ М) после облучения КгСl эксиплекской лампой.

Облучение образцов производилось по следующей методике: в химический стеклянный стакан помещали навески ПММ массой 0.025 г. Затем заливали: дистиллированной водой 20 мл (для образцов 4 и

5); раствором МЗ при концентрации $C=10^{-6}$ М (для образцов 2 и 3); раствором МЗ при концентрации $C=10^{-5}$ М (для образцов 6 и 7). Далее полученные смеси облучали КrCl лампой (длина волны излучения 222 нм) при комнатной температуре до 60 минут. Расстояние от ламп до облучаемого раствора составляло 9,5 см. Во время облучения регистрировались спектры поглощения и флуоресценции с помощью спектрофлуориметра SM2203 (фирма «SOLAR», Беларусь). После этого растворы помещали на 5 суток в темное место, после чего ПММ вынимали из растворов и высушивали 40 минут в термическом шкафу при 70 °С. Затем регистрировали ИК спектры поверхности высушенных образцов ПММ. После этого эти образцы ПММ помещали в гексан и регистрировали спектры поглощения и флуоресценции.

Результаты. Данные ИК спектров изученных образцов было выявлено присутствие алифатических гидрокарбонатов в полосах: 2970 см^{-1} - 2840 см^{-1} , 1480 см^{-1} - 1420 см^{-1} , 1400 см^{-1} - 1350 см^{-1} , 750 см^{-1} - 700 см^{-1} (рис. 1) для всех образцов, кроме образца 5.

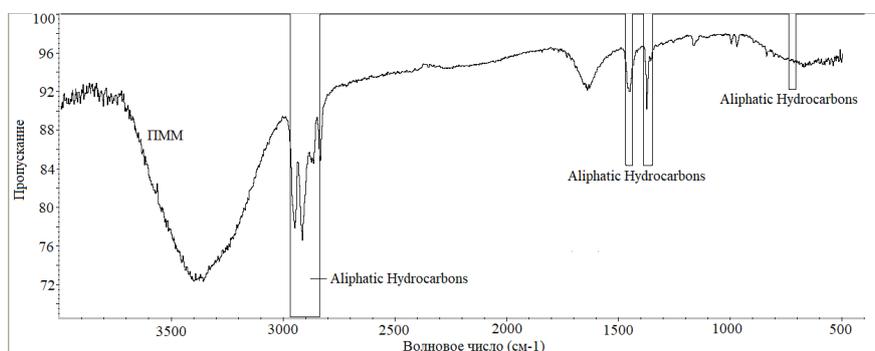


Рис. 1. Присутствие алифатических гидрокарбонатов в ИК-спектре ПММ

Наибольшая оптическая плотность наблюдается после четырех и восьми минут облучения (рис. 2). Это характерно для всех трех пиков: 310, 420 и 630 нм. При дальнейшем облучении (16 минут и более) оптическая плотность резко падает, после чего опять начинает увеличиваться. Это указывает на фотодegradацию МЗ и образование фотопродуктов, которые поглощают в той же области, что и исходная молекула. При увеличении концентрации МЗ в растворе до $C=10^{-5}$ М наибольшая оптическая

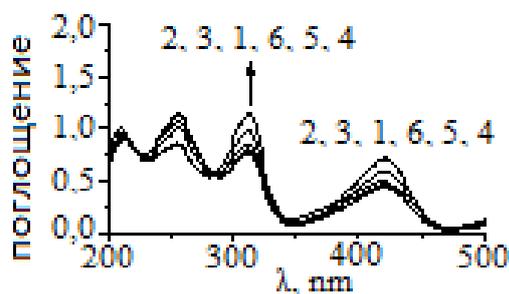


Рис. 2. Спектры поглощения МЗ ($C=10^{-6}$ М) с ПММ до (1) и после 4 (2), 8 (3), 16 (4), 32 (5) и 64 (6) минут облучения КrCl эксилампой

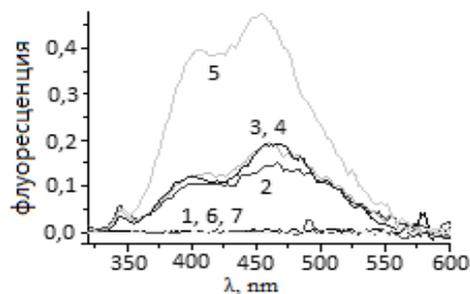


Рис. 3. Спектры флуоресценции МЗ ($C=10^{-6}$ М) с ПММ до (1) и после 2 (2), 4 (3), 8 (4), 16 (5), 32 (6) и 64 (7) минут облучения КrCl эксилампой на длине волны возбуждения 310 нм

плотность наблюдается после облучения в течении 60 мин (рис. 4, 5). Это характерно для всех трех пиков: 310, 420 и 630 нм. Активное образование фотопродуктов зафиксировано в спектрах

флуоресценции после 16 минут облучения (рис. 3, кривые 2-5). При увеличении концентрации МЗ в водном растворе образование фотопродуктов увеличивается (рис. 5). В спектрах флуоресценции образцов ПММ (№ 6 и 7) в гексане зафиксирована интенсивная флуоресценция в области 350 нм. Это полоса принадлежит флуоресценции фотопродукта, который адсорбировался на поверхности ПММ. В течении облучения раствора МЗ КrCl эксилампой. Данный фотопродукт не был зафиксирован в водном растворе.

Заключение. На основе анализа полученных результатов можно сделать вывод, что полипропиленовый микроволоконистый материал с модифицированной наночастицами поверхностью активно участвует в фотодеградаци метиленового зеленого в воде. Результаты были получены в рамках выполнения проекта научного фонда Д.И. Менделеева Томского государственного университета.

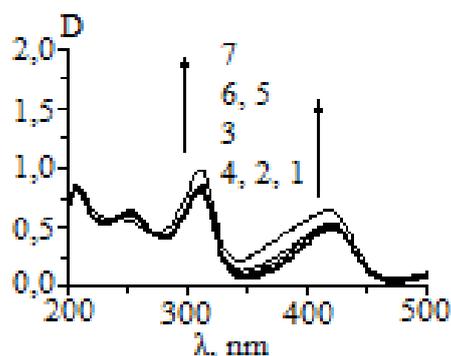


Рис. 4. Спектры поглощения МЗ ($C=10^{-5} M$) в присутствии ПММ до (1) и после 2 (2), 4 (3), 8 (4), 16 (5), 32 (6) и 64 (7) минут облучения КrCl

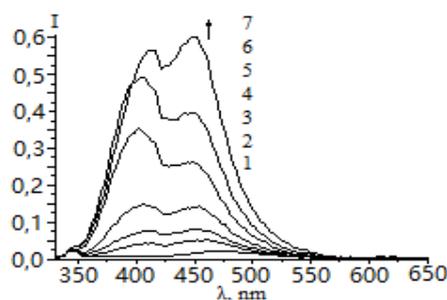


Рис. 5. Спектры флуоресценции МЗ ($C=10^{-5} M$) в присутствии ПММ до (1) и после 2 (2), 4 (3), 8 (4), 16 (5), 32 (6) и 64 (7) минут облучения КrCl эксилампой с длиной, длина волны возбуждения – 310 нм

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кемпбел Дж. Современная общая химия. – М.: Наука, 1975. – 549 с.
2. Демков А.И. Применение синтетических материалов для глубокой очистки сточных вод фильтрованием. – Х.: Факт, 2004. – 306 с.
3. Чайковская О.Н., Соколова И.В., Соколова Т.В., Юдина Н.В., Мальцева Е.В., Иванов А.А. Влияние гуминовых кислот на фототрансформацию метилфенолов в воде // Ж. прикладной спектроскопии. – 2008. – Т. 75. – № 4. – С. 578–582.
4. Bunn C.W. and Howells E.R. Chain configuration in crystalline vinyl polymers // Journal of Polymer Science Part A. – 1955. – Т.51. – P. 307–336.
5. Natta G., Corradini P., Ganis P. Prediction of the conformation of the chain in the crystalline state of tactic polymers // Journal of Polymer Science Part A. – 1962. – Т.58. – P. 1191–1199.
6. Пинчук Л.С. Многофункциональные фильтры на основе полимеров // Технологическое оборудование и материалы. – 1998. – № 3. – С. 115–120.
7. Конкин А.А., Зверев М.П. Полиолефиновые волокна. – М.: Химия, 1966. – 240 с.
8. Лукашевич О.Д., Малиновская Т.Д., Филичев С.А. Очистка природных и сточных вод и наноэффекты: ретроспективный анализ и перспективы // Вода: технология и экология. – 2008. – № 3. – С. 3–11.

**ПОЛУЧЕНИЕ ОКСИДНЫХ ПЛЕНОК ТАНТАЛА МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОЛИТИЧЕСКОГО
АНОДИРОВАНИЯ И ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ ОПТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ**Ю.В. Пилипенко, Н.А. Мухамбедярова

Научный руководитель: доцент, к.т.н. И. А. Чистоедова

Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 40,634050

E-mail: julia.pilipenko97@mail.ru**OBTAINING OF TANTAL OXIDE FILMS BY METHOD OF ELECTROLYTIC ANODIZATION AND
RESEARCH OF THEIR OPTICAL PARAMETERS**Ju.V. Pilipenko, N.A. Mukhambedyarova

Scientific Supervisor: Associate Professor, PhD I. A. Chistoyedova

Tomsk State University of Control Systems and Radioelectronics,

Russia, Tomsk, Lenin str., 40,634050

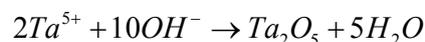
E-mail: julia.pilipenko97@mail.ru

Abstract. *In this work researches of optical characteristics of the oxidic films of tantalum received by method of electrolytic anodizing have been conducted.*

Введение. Эффективным и технологически простым методом синтеза наноструктурированных материалов с периодическим расположением нанопор на макроскопических поверхностях является процесс анодирования.

Наиболее подходящим материалом для создания нанопористых оксидных слоев является тантал. Тонкие пленки оксида тантала перспективны для применения во многих областях. В связи с низкими током утечки, высокой диэлектрической проницаемостью, относительно низкими диэлектрическими потерями и высокой диэлектрической прочностью. Низкое поглощение в оптическом диапазоне и достаточно высокий показатель преломления позволяют применять пленки Ta_2O_5 для изготовления элементов интегральной оптики, оптоэлектроники, а также в качестве антиотражающих слоев в кремниевых солнечных батареях, просветляющих покрытиях для оптических деталей и др. [1-3].

Пленка оксида, образующаяся на Ta во время анодирования, является продуктом реакции:



Целью данной работы является исследование оптических параметров пленки оксида тантала, полученной методом электролитического анодирования.

Материалы и методы исследования. Методом ионно-плазменного распыления в вакуумной установке УВН-2М были изготовлены экспериментальные образцы пленок тантала, нанесенных на ситалловую подложку, имеющую размеры 6 × 4,8 см. Предварительно, образцы обжигались в вакууме в течение 30 минут. Пленку тантала напыляли в атмосфере Ag в течении 20 минут при напряжении $U = 300$ В, ток разряда $I = 200$ мА. Давление остаточных газов в вакуумной камере составило $P = 6 \cdot 10^{-2}$ мм рт.ст.

Схема экспериментальной установки для электрохимического окисления поверхности Ta представлена на рисунке 1.



Рис. 1. Схема экспериментальной установки для анодирования

Анодирование пленки Ta ($d = 129$ нм, $\rho_s = 18,6 \frac{\text{Ом}}{\text{см}}$) проводилось в электролитической ванне, заполненной водным раствором электролита, содержащем 1% - ый раствор лимонной кислоты $\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7$. В электролит помещался анод, которым является пленка тантала, а в качестве катода была использована серебряная пластина. Электрохимическое окисление проводилось при постоянном токе 6,8 мА, при напряжении 270 В и времени анодирования 2 минуты.

Результаты. Приведен микрорентгеноспектральный анализ образцов до анодирования и после на рисунке 2.

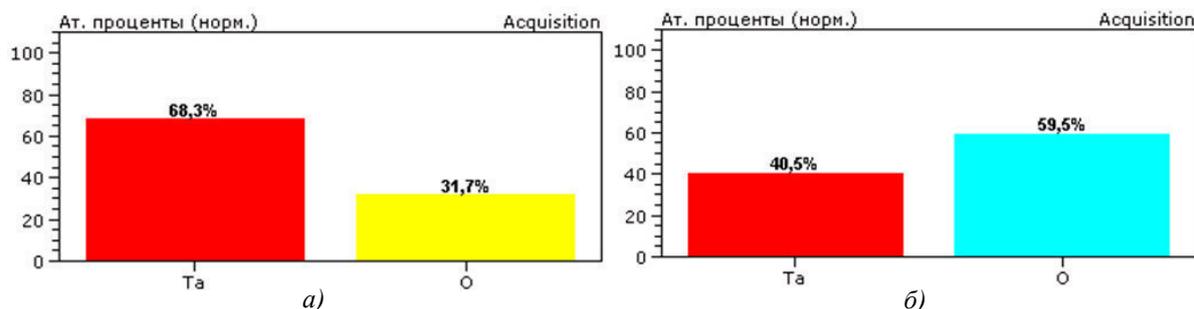


Рис. 2. Микрорентгеноспектральный анализ: а – до анодирования; б – после анодирования

Из полученного анализа видно, что до анодирования в составе пленки имеется содержание кислорода 31,7%, образовавшегося в результате напыления. После анодирования содержание кислорода увеличилось до 59,5%, а тантала уменьшилось до 40,5%. Это позволяет сделать вывод, что на подложке сформировалось покрытие Ta_xO_y .

Были сняты спектры отражения полученной окисной пленки тантала (1) с ИК Фурье-спектрометра «Инфралюм ФТ-801» и эталонного образца (2) Ta_xO_y .

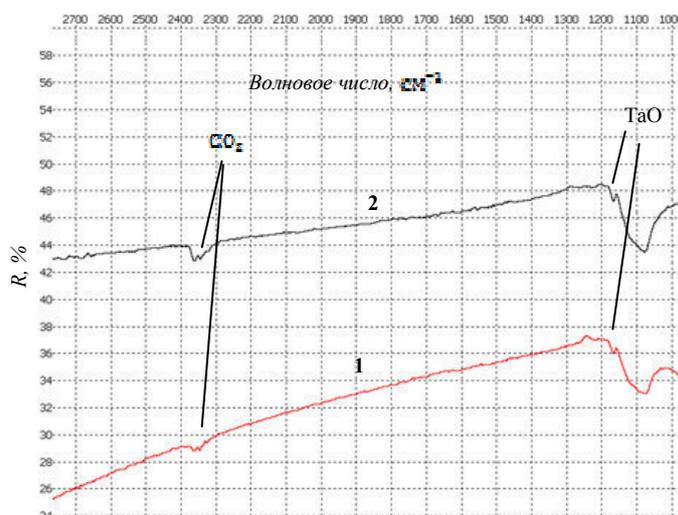


Рис. 3. Спектры отражения: 1 – окисной пленки Ta; 2 – эталонного образца Ta_2O_5

С помощью спектрального эллипсометрического комплекса «Эллипс САГ 1891» были определены поляризационные углы $\psi = 42,352$ и $\Delta = 58,519$. Толщина окисла составила $d = 57,52$ нм.

Согласно результатам эллипсометрии показатель преломления исходного образца до анодирования составил $n = 2,98$, а после анодирования $n = 1,88$ на длине волны $\lambda_0 = 632,8$ нм. Уменьшение показателя преломления связано с наличием воздушных пор в структуре пленки.

Уменьшение коэффициента поглощения от длины волны до анодирования $k = 2,24$, а после анодирования $k = 0,028$ свидетельствует о снижении поглощательной способности оксидной пленки.

По полученным результатам коэффициент отражения от длины волны до анодирования составил $R = 58\%$, а после анодирования $R = 13,8\%$ относительно серебра. Следовательно, пленки могут быть использованы в качестве антиотражающих покрытий.

Заключение. Таким образом, оптические параметры пленки, полученной методом электролитического анодирования, зависят от технологических режимов анодирования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Исмаилов Т.А., Шангереева Б.А., Шахмаева А.Р. Способ получения тонких пленок (Ta_2O_5) для интегральных схем // Известия вузов. Северо-Кавказский регион. Естественные науки. – 2006. – Т. 1. – №1. – С. 48–51.
2. Бурмаков А.П., Кулешов В.Н. Магнетронное осаждение пленок оксида тантала с электретным зарядом//8-я международная конференция «Взаимодействие излучений с твердым телом». – 2009. – Т. 1. – №6. – С. 302–304.
3. Комлев А.Е., Бабинова Р.В., Шутова Е.С. Свойства плёнок оксинитрида тантала, осажденных методом реактивного магнетронного распыления металлической мишени//Фундаментальные проблемы радиоэлектронного приборостроения «INTERMATIC–2017». – 2017. – Т. 17. – №2. – С. 421–424.

СВЕРХЭЛАСТИЧНОСТЬ В СОСТАРЕННЫХ МОНОКРИСТАЛЛАХ СПЛАВА FeMnAlNi

В.В. Поклонов

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. Ю.И. Чумляков
Национальный исследовательский Томский государственный университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050
E-mail: poklonov_vyacheslav@mail.ru

SUPERELASTICITY IN AGED SINGLE CRYSTALS OF FeMnAlNi ALLOY

V.V. Poklonov

Scientific Supervisor: Prof., Dr. Yu.I. Chumlyakov
National Research Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050
E-mail: poklonov_vyacheslav@mail.ru

Abstract. На [112]-монокристаллах $Fe_{43,5}Mn_{34}Al_{15}Ni_{7,5}$ показано, что при старении при $T = 437$ К, 3 h наблюдается высокотемпературная сверхэластичность при деформации растяжением в температурном интервале от 298 К до 473 К. Экспериментально установлено, что механические и функциональные свойства зависят от ориентации кристалла, которая определяет вклад деформации раздвойникованием ϵ_{detw} в теоретическую величину деформации решетки.

Введение. Сплавы с памятью формы (СПФ) представляют собой уникальный класс материалов, которые при механической нагрузке/разгрузке проявляют большие обратимые изменения формы – сверхэластичность (СЭ), обусловленную термоупругими мартенситными превращениями (МП). В настоящее время интерметаллиды на основе NiTi являются наиболее применяемыми в промышленности СПФ, однако существует ряд проблем, связанных с созданием и обработкой заготовок, которые приводят к значительному удорожанию материала, и препятствуют его широкому использованию [1, 2]. СПФ на основе Fe являются альтернативой NiTi благодаря более низкой стоимости компонентов и простоты обработки. Особый интерес представляет сплав FeMnAlNi, разработанный в 2011 году [3], в котором наблюдается слабая температурная зависимость напряжений $\sigma_{кр}$, необходимых для начала развития МП под нагрузкой, способствующая проявлению СЭ в широком температурном интервале от 77 К до 513 К, а также необычный механизм термоупругого МП из высокотемпературного α (ОЦК) аустенита в γ' (ГЦК) мартенсита. В [001]-монокристаллах $Fe_{43,5}Mn_{34}Al_{15}Ni_{7,5}$ при деформации растяжением обнаружена СЭ до 3,5 % в температурном интервале от 77 К до 513 К и слабая температурная зависимость $\sigma_{кр}$, характеризующаяся величиной $\alpha^{[001]} = d\sigma_{кр}/dT = 0,54$ МПа/К [4]. В работе [5] на [123]-монокристаллах $Fe_{43,5}Mn_{34}Al_{15}Ni_{7,5}$ при деформации растяжением обнаружена СЭ до 7,8 %. В [001]- и [123]-ориентациях при деформации растяжением теоретическая величина деформации решетки ϵ_0 определяется суммой вкладов деформации образования сдвойникованной структуры мартенсита ϵ_{CVP} и деформации раздвойникованием γ' -мартенсита ϵ_{detw} , тогда как в [122]-кристаллах ϵ_0 определяется только деформацией ϵ_{CVP} и $\epsilon_0^{[122]} = \epsilon_{CVP} = 8$ % [3]. Целью настоящей работы является исследование высокотемпературной СЭ при деформации растяжением в [122]-монокристаллах $Fe_{43,5}Mn_{34}Al_{15}Ni_{7,5}$ (ат.%) в температурном интервале от 298 К до 473 К.

Материалы и методы исследования. Монокристаллы сплава $Fe_{43,5}Mn_{34}Al_{15}Ni_{7,5}$ (ат.%) выращивали в среде инертного газа методом Бриджмена. Ориентацию кристаллов определяли на дифрактометре ДРОН-3. Образцы для растяжения вдоль [122]-направления вырезали на электроискровом станке. После роста монокристаллы выдерживали в атмосфере инертного газа He при 1480 К, 1 час с последующей закалкой в воду. Для выделения наноразмерных частиц В2-фазы проводили старение в атмосфере He при температуре 473 К, 3 часа. Механические свойства исследовали на испытательной машине Instron 5969 при скорости деформации $4 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$.

Результаты. Для исследования СЭ проводились два типа испытаний на растяжение: деформация до 2 % при различных температурах испытания от 298 до 473 К и эксперименты по циклированию при комнатной температуре. На рис. 1 представлены результаты исследования температурной зависимости критических напряжений $\sigma_{кр}$ для состаренных [122]-монокристаллов $Fe_{43,5}Mn_{34}Al_{15}Ni_{7,5}$ при деформации растяжением. Видно, что с ростом температуры испытания происходит линейный рост $\sigma_{кр}$, который описывается соотношением Клапейрона-Клаузиуса [1]:

$$\alpha = \frac{d\sigma_{кр}}{dT} = -\frac{\Delta H}{\varepsilon_0 T_0} \quad (1)$$

Здесь ΔH – изменение энтальпии при γ - α' -МП; ε_0 – деформация превращения; T_0 – температура химического равновесия фаз. Значение величины $\alpha^{[122]}$, полученное для состаренных [122]-монокристаллов, составляет 0,53 МПа/К. Это значение равно величине $\alpha^{[001]}$, полученной в работе [4]. Также с ростом температуры испытания происходит слабое увеличение механического гистерезиса $\Delta\sigma$: при температуре 298 К $\Delta\sigma = 200$ МПа, а при увеличении температуры испытания до 473 К $\Delta\sigma$ увеличивается до 295 МПа.

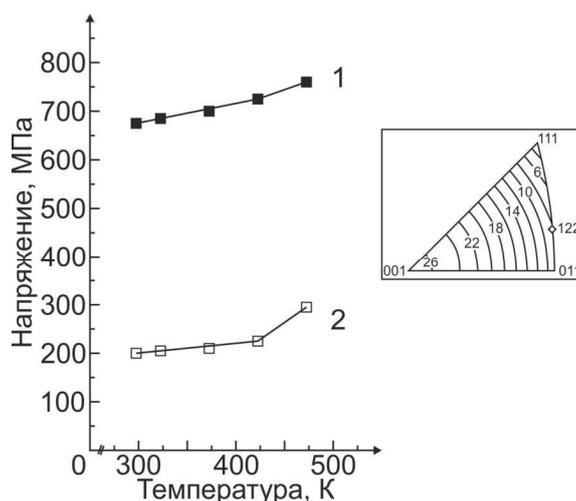


Рис. 1. Температурная зависимость критических напряжений $\sigma_{кр}$ (кривая 1) и механического гистерезиса $\Delta\sigma$ (кривая 2) в состаренных [122]-монокристаллах $Fe_{43,5}Mn_{34}Al_{15}Ni_{7,5}$ при деформации растяжением. На вставке указана исследуемая ориентация кристаллов [122], отклоненная от направления [110] на $11,5^\circ$, и теоретически рассчитанная величина ε_0

На рис. 2 представлена зависимость обратимой деформации и механического гистерезиса $\Delta\sigma$ от заданной деформации при исследовании СЭ при комнатной температуре для состаренных [122]-монокристаллов $Fe_{43,5}Mn_{34}Al_{15}Ni_{7,5}$ при деформации растяжением. Видно, что величина $\varepsilon_{СЭ}$ линейно

возрастает с ростом заданной деформации. Максимальное значение СЭ при заданной величине деформации 4,5 % оказывается равным 4 %. При увеличении заданной деформации выше 4,5 % происходит хрупкое разрушение образца. Максимальное значение СЭ ограничивается пластичностью кристалла и не достигает величины ϵ_0 . Из рис. 2б видно, что значение механического гистерезиса при заданной величине деформации 2 % составляет $\Delta\sigma = 200$ МПа, а при $\epsilon = 4,5$ % увеличивается до 260 МПа. Величина $\Delta\sigma$ в [122]-монокристаллах при комнатной температуре равна величине, полученной в работе [3] для кристаллов, ориентированных вдоль направления [123], и меньше, чем в [001]-кристаллах, равной 350 МПа. Это связано с влиянием внешних напряжений на процессы раздвойнивания мартенсита в [001]-кристаллах и его отсутствием в [122]-кристаллах.

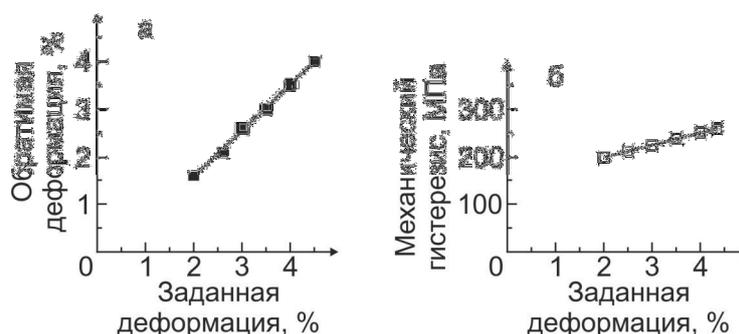


Рис. 2. Зависимость обратимой деформации (а) и механического гистерезиса $\Delta\sigma$ (б) от заданной деформации при температуре 298 К для состаренных [122]-монокристаллов $Fe_{43,5}Mn_{34}Al_{15}Ni_{7,5}$ при деформации растяжением

Заключение. Таким образом, в состаренных [122]-монокристаллах $Fe_{43,5}Mn_{34}Al_{15}Ni_{7,5}$ при деформации растяжением, в которых ϵ_0 определяется только деформацией ϵ_{CVP} и раздвойнивания мартенсита не происходит, наблюдается температурная зависимость $\sigma_{кр}$ с малым коэффициентом $\alpha = 0,53$ МПа/К. Максимальное значение СЭ в [122]-кристаллах при комнатной температуре составляет 4%.

Работа выполнена при поддержке Программы повышения конкурентоспособности ТГУ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Otsuka K. Shape memory materials / K. Otsuka, C. M. Wayman. – Cambridge University press, 1998. – 284 p.
2. Otsuka K. Physical metallurgy of Ti–Ni-based shape memory alloys / Otsuka K., Ren X. // Progress in Materials Science. – 2005. – V.50. – P. 511 – 678.
3. Superelastic effect in polycrystalline ferrous alloys / T. Omori [et al.] // Science. – 2011. – Vol. 333. – P. 68–71.
4. Superelastic response of a single crystalline FeMnAlNi shape memory alloy under tension and compression / L.W. Tseng [et al.] // Acta Materialia. – 2015. – Vol. 89. – P. 374–383.
5. Effects of crystallographic orientation on the superelastic response of FeMnAlNi single crystals / L.W. Tseng [et al.] // Scripta Materialia. – 2016. – Vol. 116. – P. 147–151.

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА В
ТКАНЕЭКВИВАЛЕНТНЫХ МАТЕРИАЛАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИНСТРУМЕНТАРИЯ
GEANT4**

А.Э. Прокопьев, И.А. Милойчикова, А.А. Красных

Научный руководитель: к.ф.-м.н. С.Г. Стучебров

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: sasha1641996@gmail.com

**NUMERICAL SIMULATION OF THE ELECTRON BEAM DISTRIBUTION IN TISSUE-
EQUIVALENT MATERIALS USING GEANT4**

A.E. Prokopyev, I.A. Miloichikova, A.A. Krasnykh

Scientific Supervisor: PhD S.G. Stuchebrov

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: sasha1641996@gmail.com

***Abstract.** The numerical model of the electron beam dose distribution in ABS and HIPS plastics was developed. The calculation results were compared with experimental data of depth dose distribution of electron beam in water phantom for applicability estimation of these polymer materials for the imitation of biological tissues.*

Введение. Электронные пучки являются важным медицинским инструментом для обеспечения точной доставки дозы при облучении поверхностных новообразований. Их применение позволяет минимизировать воздействие на здоровые ткани и органы [1]. Повышение точности процедур лучевой терапии обеспечивается дозиметрическим планированием. Для этого применяются как расчетные методы, так и экспериментальные. В работе [2] рассматривается возможность создания индивидуальных фантомов для экспериментальной верификации планов облучения, которые имитируют различные плотности тканей человека, при помощи аддитивных технологий. Методы трехмерной печати, используемые в данной работе, основаны на послойном наплавлении пластика. Одними из наиболее распространенных материалов, применяемых для этого, являются АБС и НІPS пластики.

Данная работа направлена на разработку модели прохождения электронов через АБС и НІPS пластики. Для оценки применимости исследуемых материалов для имитации биологических тканей результаты расчетов сравниваются с полученными экспериментально глубинными распределениями доз электронов в водном фантоме.

Материалы и методы. В работе использованы глубинные распределения доз электронов в воде, измеренные в отделении радиологии Московской городской онкологической больницы № 62. Для измерения использовалась камера цилиндрическая SNC125с и фантом 3D Scanner производства Sun Nuclear [3]. Источником являлся клинический ускоритель электронов ONCOR Impression Plus (Siemens) [4]. Амплитуда шумов измерений находилась в пределах 0,5%.

На первом этапе основной задачей было моделирование источника электронов с распределением энергии по Гауссу. Схема эксперимента приведена на рисунке 1.

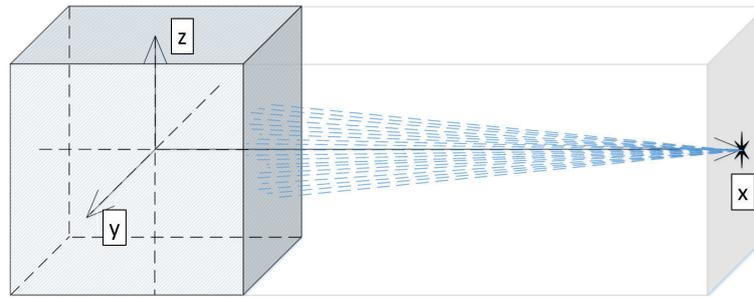


Рис. 1. Схема моделирования прохождения электронов

На расстоянии 100 см от фантома с размерами 30х30х30 см, расположен точечный источник электронов. Детектирование прохождения электронов происходит во всем объеме вещества. Начальная энергия электронов: 6, 12, 18 МэВ, что соответствует экспериментальным данным.

Результаты и обсуждения. В связи с тем, что фактическая средняя энергия и спектральное распределение энергии электронов в пучке реального ускорителя точно не известны, для моделирования необходимо провести подбор данных параметров. На рисунке 2 представлен пример расчетов глубинных распределений доз электронов (со средней энергией 5,8 МэВ) в воде с различными параметрами пучка и приведено сравнение с экспериментальными данными.

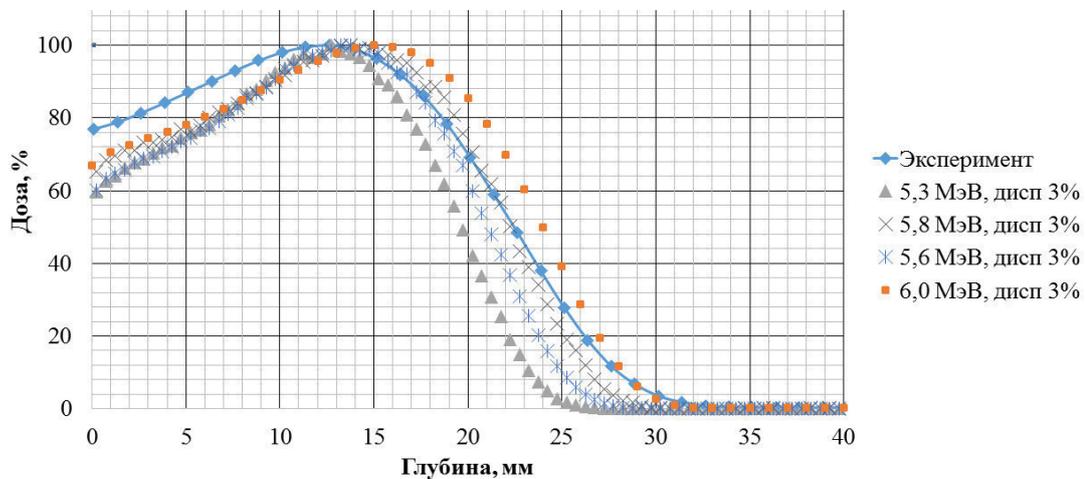


Рис. 2. Расчет глубинных распределений доз электронов (со средней энергией близкой к 6 МэВ) в воде с различными параметрами пучка и сравнение с экспериментальными данными

По рисунку 2 видно, что наибольшее соответствие эксперименту наблюдается при средней энергии электронов 5,8 МэВ с дисперсией 3%. Для энергии 12 МэВ данные параметры равны 11,3 МэВ с дисперсией 3%. Для энергии 18 МэВ – 17,9 МэВ с дисперсией 3%.

На следующем этапе было проведено сравнение расчетных глубинных распределений доз электронов в воде и пластиках. На рисунке 3 представлены результаты для разных энергий электронов.

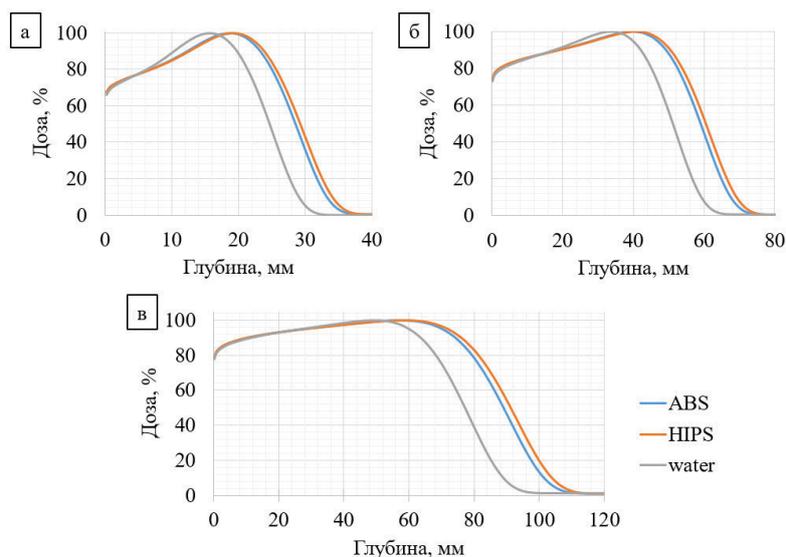


Рис. 3. Расчетные процентные глубинные распределения доз электронов в тканезквивалентных средах
а – электроны с энергией 6 МэВ; б – 12 МэВ, в – 18 МэВ

Как видно из рисунка 3, глубинные распределения доз в пластиках имеют очень близкие формы. Глубина максимума поглощения дозы в воде меньше чем в пластиках, что влияет на общую разницу в полученных зависимостях.

Заключение. В рамках данного исследования были разработаны модели источника излучения и материалов – воды, АБС и НПС пластика. На основе экспериментальных данных были подобраны оптимальные энергетические характеристики моделируемых пучков для энергий 6, 12 и 18 МэВ. Было проведено сравнение глубинных распределений доз электронов в воде, АБС и НПС пластиках. Несмотря на имеющиеся отличия распределений глубинных доз в пластиках от распределений в воде, их можно использовать в качестве тканезквивалентных материалов с применением соответствующих поправочных коэффициентов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Podgorsak E. B. Radiation oncology physics: a handbook for teachers and students. International Atomic Energy Agency, 2005. 657 p.
2. Данилова И.Б., Красных А.А., Милойчикова И.А., Стучебров С.Г. Моделирование взаимодействия гамма-излучения и АБС-пластика с различными металлическими примесями // Вестник национального исследовательского ядерного университета «МИФИ». – 2017. – Т. 6 - № 1. – С. 78–82.
3. Sun Nuclear Corporation [Электронный ресурс] – режим доступа: <https://www.sunnuclear.com/>. – 12.02.2018.
4. Siemens Linear Accelerator Comparison Chart [Электронный ресурс] – режим доступа: <https://www.oncologysystems.com/radiation-therapy/linear-accelerators/siemens-linear-accelerators-chart.php>. – 12.02.2018.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ДЕФОРМАЦИОННОГО ПОВЕДЕНИЯ СЕГМЕНТА ШЕЙНОГО ОТДЕЛА
ПОЗВОНОЧНИКА ПРИ ДЕФОРМАЦИИ МЕЖПОЗВОНОЧНОГО ДИСКА**

Ю. А. Рикун

Научный руководитель: д.ф.-м.н. Т.В. Колмакова

Национальный исследовательский Томский государственный университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050

E-mail: yulirik.93@mail.ru

**INVESTIGATION OF DEFORMATION BEHAVIOR OF CERVICAL SPINE SEGMENT DURING
THE DEFORMATION OF THE INTERVERTEBRAL DISC**

Yu. A. Rikun

Scientific Supervisor: Dr. T.V. Kolmakova

Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050

E-mail: yulirik.93@mail.ru

***Abstract.** In this paper the stress-strain state of the model cervical spine segment is regarded. The deformation behavior of the intervertebral disc during the deformation of the intervertebral disc is studied.*

Введение. Позвоночник является одной из важнейших структур человеческого организма. Благодаря своей структуре, позвоночник выполняет жизненно необходимые для организма человека функции, например, такие как: функция опоры и движения, а также играет важную роль в способности человеческого организма к прямохождению [1]. Межпозвоночный диск, является неотъемлемой частью позвоночного столба. С его помощью обеспечивается подвижность позвонков, равномерно распределяется нагрузка по позвоночнику в целом.

К сожалению, нередки случаи, особенно в среднем и пожилом возрасте, когда происходят дегенеративные изменения межпозвоночного диска. В такой ситуации необходимо заменить межпозвоночный диск имплантатом. Адекватное развитие и индивидуальный подбор имплантатов играют важную роль в лечении человека. Неправильный выбор материалов и дизайна имплантата могут привести к ухудшению состояния костной ткани и функционирования позвоночника в целом. Использование методов компьютерного моделирования позволяет более глубоко понять закономерности функционирования позвоночника в норме, при патологиях, при взаимодействии с имплантатом, что облегчает выбор подходящего протеза для конкретного человека.

Целью данной работы является исследование деформационного поведения сегмента шейного отдела позвоночника при деформации межпозвоночного диска.

Модель шейного сегмента позвоночника. В рамках данной работы была построена геометрическая модель сегмента С3-С4 шейного отдела позвоночника, представленная на рисунке 1.

Геометрическая модель состоит из позвонков С3 (№1) и С4 (№2), межпозвоночного диска (МПД) (№3), фасеточных суставов (№4), межкостистой связки (№5), задних дуг позвонков (№6), остистых (№7), поперечных (№8) и суставных (№9) отростков. Ось Z системы координат направлена вдоль оси сегмента. В позвонках учитывалось наличие компактной и губчатой (№10) костных тканей. Материал компактной

и губчатой костных тканей тел позвонков, материалы межпозвоночного диска, фасеточных суставов, межостистой связки, дуг и отростков считались изотропными линейно-упругими материалами.

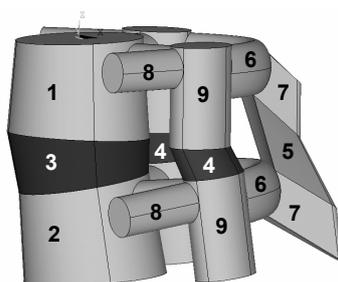


Рис. 1. Геометрическая модель сегмента С3-С4 шейного отдела позвоночника

Дегенеративные изменения межпозвоночного диска моделировались посредством уменьшения средней высоты диска с 6 мм до 4.3 мм и увеличения его модуля упругости от 2.5 МПа до 98 МПа в соответствии с данными работ [2,3], что в реальности наблюдается в результате уменьшения содержания воды в диске [1]. Также в работе принималось во внимание существование естественного изгиба шейного отдела позвоночника – лордоза. Наличие природного изгиба позвоночника обеспечивает разную высоту межпозвоночного пространства спереди и сзади, занимаемого межпозвоночным диском, который необходимо заменить имплантатом [4, 5].

Проводился расчет напряженно-деформированного состояния модельного сегмента шейного отдела позвоночника с помощью программного комплекса ANSYS с использованием метода конечных элементов. Задавались нагрузки, соответствующие физиологическому сгибанию сегмента шейного отдела позвоночника.

Результаты. Исследование влияния дегенеративных изменений межпозвоночного диска на деформационное поведение сегмента С3-С4 позвоночника показало, что во время сгибания верхний позвонок С3 движется вперед в отрицательном направлении оси X и вниз, уменьшая межпозвоночное пространство. Были определены перемещения передней точки позвонка С3 (отмечена черной точкой на рис. 2)

На рисунке 3 изображены графики зависимости полей перемещений UZ от отношения высот передней части МПД (I1) к задней его части (I2). Из рисунка 3(а, б) видно, что по мере снижения высоты межпозвоночного диска подвижность диска уменьшается. По мере увеличения модуля упругости подвижность диска уменьшается, как видно из рисунка 3 (в, г).

Заключение. В ходе проделанной работы можно сделать следующий вывод. Дегенеративные изменения межпозвоночного диска, а именно уменьшение высоты и увеличение модуля упругости диска приводят к уменьшению подвижности позвонка С3.

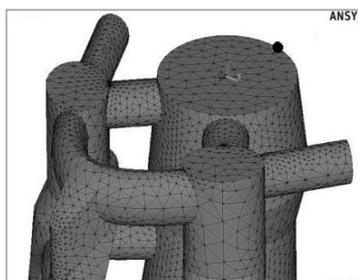


Рис. 2. Местоположение передней точки позвонка С3

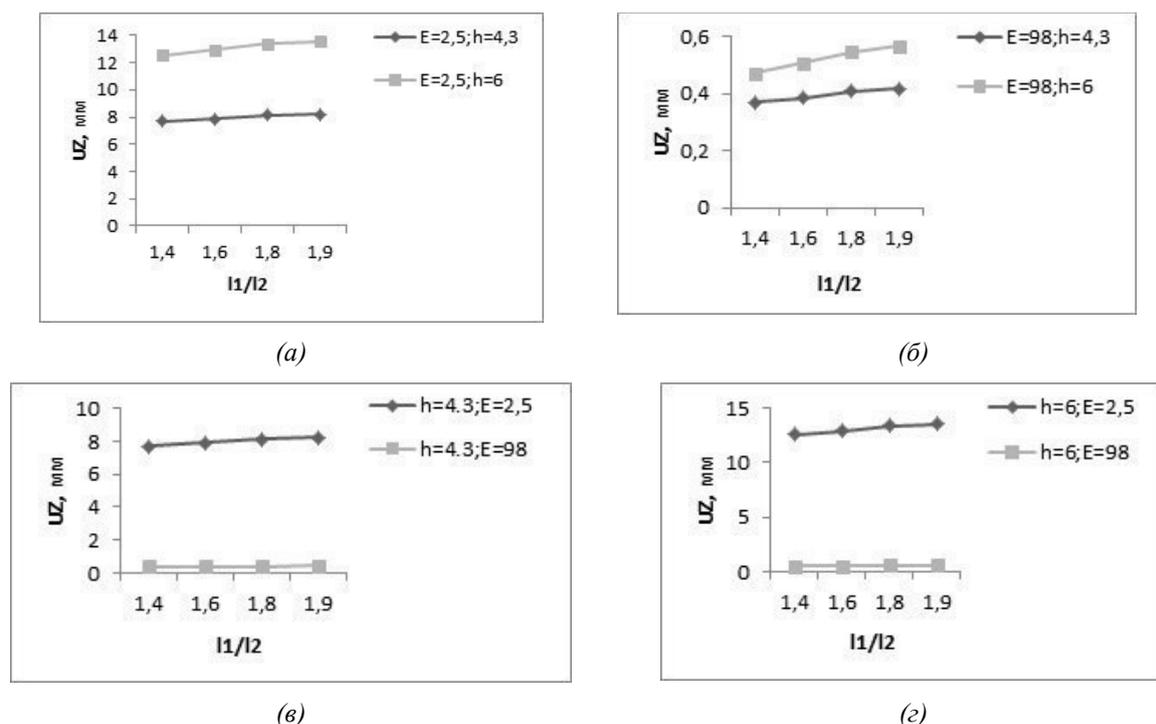


Рис. 3. Зависимость полей перемещений U_Z от отношения высот передней части МПД (l_1) к задней его части (l_2): (а), (б) при фиксированном значении E (МПа) и разными значениями средней h (мм); (в), (г) при фиксированном значении средней h (мм) и разными значениями E (МПа)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кремер, Ю. Заболевания межпозвонковых дисков. – М. : МЕДпресс-информ, 2013. – 472 с.
2. Effective modulus of the human intervertebral disc and its effect on vertebral bone stress / H. Yang [et al.] // Journal of Biomechanics. – 2016. – Vol. 49. – No. 7. – P. 1134–1140.
3. Gilad I. A Study of Vertebra and Disc Geometric Relations of the Human Cervical and Lumbar Spine // Spine. – 1986. – Vol. 11. – No. 2. – P. 154–157.
4. Latif M J A Characterisation and Modelling of Spinal Facet Joints // Ph.D. thesis (The University of Leeds). – 2011. – P. 336.
5. Sohn H M, You J W and Lee J Y The relationship between disc degeneration and morphologic changes in the intervertebral foramen of the cervical spine: a cadaveric MRI and CT study // J. Korean Med. Sci. – 2004. – Vol. 19(1). – P. 101–106.

**МЕХАНИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СИЛУМИНА ЗАЭВТЕКТИЧЕСКОГО СОСТАВА,
ПОДВЕРГНУТОГО ИОННО-ЭЛЕКТРОННО-ПЛАЗМЕННОЙ МОДИФИКАЦИИ**М.Е. Рыгина^{1,2}, А.Д. Тересов², В.В. Шугуров²Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. Ю.Ф. Иванов^{1,2}¹Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр-т Ленина, 30, 634050

²Институт сильноточной электроники СО РАН

Россия, г. Томск, пр-т. Академический, 2/3, 634055

E-mail: L-7755me@mail.ru

**MECHANICAL CHARACTERISTICS OF THE HYPEREUTECTIC SILUMIN PROCESSED BY ION-
ELECTRON-PLASMA MODIFICATION**M.E. Rygina¹, A.D. Teresov², V.V. Shugurov²Scientific Supervisor: Prof., Dr. Yu.F. Ivanov^{1,2}¹Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050²Institute of High Current Electronics SB RAS, Russia, Tomsk, Academic str., 2/3, 634055

E-mail: L-7755me@mail.ru

Abstract. *In this paper, the possibility of modifying the surface of a hypereutectic silumin (Al-(18-24) wt.%Si) is shown. Modification of the samples was carried out in two stages. At the first stage, a "film (Zr-5% Ti-5% Cu) / (Al- (18-24) wt.% Si) film system was formed by an ion-plasma method with an arc-sputtering of a Zr-5% Ti-5% cathode % Cu in the "TRIO" installation (IHCE SB RAS). In the second stage, the surface layer of the silumin of the hypereutectic composition was doped by melting the "film-substrate" system with an intense pulsed electron beam at the "SOLO" installation.*

Введение. Силумин перспективный материал для изготовления подшипников и поршней. На данный момент в промышленности преимущественно применяются силумины с составом, близким к эвтектическому, то есть содержание кремния в которых изменяется в пределах (11-13) вес.%. Использование заэвтектических силуминов оправдано высокой твердостью, за которую отвечает кремний. Как было показано в работе [1], твердость силумина увеличивается пропорционально концентрации в сплаве кремния. Негативным фактором заэвтектических силуминов, существенно ограничивающих их более широкое применение в промышленности, является присутствие в структуре крупных (десятки-сотни микрометров) включений кремния и большое количество микропор. Преимущественно по этим причинам использование деталей, изготовленных из заэвтектического силумина сразу после отливки, не представляется возможным.

Цель настоящей работы – выявление возможности повышения механических (микротвердость) и трибологических (износостойкость) свойств заэвтектического силумина ионно-электронно-плазменными методами.

Материалы и методы исследования. Образцы заэвтектического силумина с содержанием кремния 18-24 вес. % имели форму цилиндра высотой 5 мм, диаметром 30 мм. На первом этапе на установке «ТРИО» [2] наносили пленку состава Zr-5%-Ti-5%Cu (толщина пленки 0,5 мкм). На втором

этапе система «пленка (Ti-Zr-Cu) / (Al-(18-24) вес. % Si) подложка» подверглась обработке интенсивным импульсным электронным пучком (установка «СОЛО» [3]). Режимы облучения: энергия ускоренных электронов 18 кэВ, плотность энергии пучка электронов 20-40 Дж/см², частота следования импульсов 0,3 с⁻¹, длительность воздействия пучка электронов 200 мкс, число импульсов воздействия 20. Режим облучения выбран согласно тепловым расчетам [4,5]. Образцы исследовали методами оптической (μ Vizo-MET-221) и электронной сканирующей (SEM-515 Philips) микроскопии. Испытания на твердость осуществляли на установке ПМТ-3. Исследования износостойкости силумина проводилось в геометрии диск-штифт при комнатной температуре и влажности на установке TRIBOtechnik. Объем износа материала определялся после проведения профилометрии образовавшегося трека.

Результаты и их обсуждение. Структура образцов силумина в исходном состоянии представлена зернами эвтектики Al-Si, включениями первичного кремния, размер которых достигает 100 мкм, а также включениями интерметаллидов. Выявлено большое количество микропор. Твердость образцов в зависимости от количества кремния варьируется от 890 МПа до 1090 МПа и увеличивается с ростом концентрации кремния (таблица 1). Износостойкость образцов в зависимости от концентрации кремния изменяется немонотонным образом (таблица 1), что, очевидно, обусловлено неоднородным распределением присутствующих в материале зерен кремния, обладающих повышенной хрупкостью.

Таблица 1

Твердость и износостойкость исходных образцов заэвтектического силумина (18-24 вес. % Si)

Концентрация кремния, вес.%	Твердость, МПа	Скорость износа, 10 ⁻⁴ , мм ² /Н*м
18-20	890	3,1
20-22	970	1,9
22-24	1090	5,5

Пленка Zr-Ti-Cu, сформированная при электродуговом распылении катода состава Zr-5% Ti-5%Cu, характеризуется наличием микрокапельной фракции (рис. 1, а).

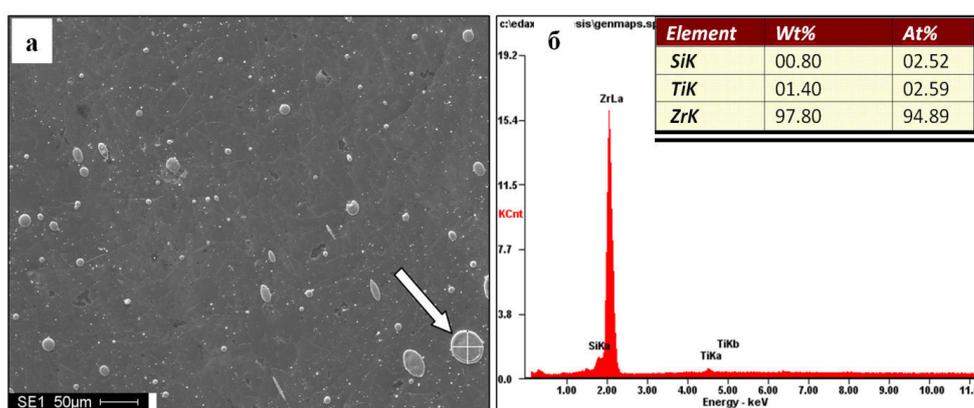


Рис.1. Структура пленки Zr-Ti-Cu (а) и энергетические спектры (б), полученные с капли, указанной на (а) стрелкой. Подложка – силумин состава Al-(22-24) вес. % Si.

Методами микрорентгеноспектрального анализа показано, что капли состоят преимущественно из атомов циркония (рис. 1, б). После обработки системы «пленка (Zr-Ti-Cu) / (Al-(18-24) вес. %) Si) подложка» интенсивным импульсным электронным пучком на поверхности модифицирования

наблюдается структура высокоскоростной кристаллизации, представленная кристаллитами, размер которых (0,5-1) мкм.. Толщина модифицированного слоя колеблется в пределах от 100 мкм до 150 мкм и определяется режимом облучения. Выполнены механические испытания и выявлено кратное (в 3,7-5,5 раз) увеличение микротвердости модифицированных образцов относительно образцов в литом состоянии. Установлено, что микротвердость облученных образцов зависит как от концентрации кремния в силумине, так и от плотности энергии пучка электронов. Обнаружено, что с увеличением содержания кремния микротвердость поверхностного слоя облученного силумина снижается от 4837,1 МПа (30 Дж/см², 200 мкс, 20 имп.) для сплава Al-(18-20 вес. %) Si до 4026,5 МПа (20 Дж/см², 200 мкс, 20 имп.) для сплава Al-(22-24 вес. %) Si. Проведены трибологические испытания и выявлено кратное (в 2,6-1,8 раз) увеличение износостойкости модифицированных образцов относительно образцов в литом состоянии. Установлено, что износостойкость облученных образцов увеличивается с ростом концентрацией кремния в силумине и слабо зависит от плотности энергии пучка электронов в указанном интервале величин. Так при параметрах пучка электронов 40 Дж/см², 200 мкс, 20 имп. износостойкость облученного образца силумина с концентрацией кремния (18-20) вес. % превышает износостойкость литого состояния в 1,8 раза, а при концентрации кремния (22-24) вес. % – в 2,6 раза.

Заключение. Выявлена возможность увеличения механических (микротвердость) и трибологических (износостойкость) характеристик заэвтектического силумина с содержанием кремния, изменяющегося в пределах от 18 вес. % до 24 вес. %. Показано, что при облучении системы «пленка (Zr-Ti-Cu) / (Al-(18-24 вес. %) Si) подложка» максимальная твердость модифицированного поверхностного слоя наблюдается у сплава Al-(18-20 вес. %) Si и превышает твердость литого состояния в 5,5 раз; максимальная износостойкость наблюдается у сплава Al-(22-24 вес. %) Si и превышает износостойкость литого состояния в 2,6 раза. Соответственно полученным результатам наиболее перспективным к использованию материалом является силумин с содержанием кремния 18-20 вес. %, при облучении которого удается достичь высоких значений как твердости, так и износостойкости.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Gracheva M. E., Ivanov Y. F., Laskovnev A. P., Teresov A. D., Cherenda N. N., Uglov V. V., Petrikova E. A., Astashinskaya M. V. Modification of the sample's surface of hypereutectic silumin by pulsed electron beam // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. - 2016 - Vol. 124, Article number 012138. - p. 1-5.
2. Эволюция структуры поверхностного слоя стали, подвергнутой электронно-ионно-плазменным методам обработки / под общ. ред. Н.Н. Коваля и Ю.Ф. Иванова. – Томск: Изд-во НТЛ, 2016. – 304 с.
3. Коваль, Н. Н., Иванов Ю.Ф. Наноструктурирование поверхности металлокерамических и керамических материалов при импульсной электронно-пучковой обработке // Известия вузов. Физика. -2008. - Т. 51. - № 5. - С. 60-70.
4. Yurii F. Ivanov, Olga V. Krygina, M. Rygina, E. A. Petrikova, A. D. Teresov, V. V. Shugurov, O. V. Ivanova, I. A. Ikonnikova Combined modification of aluminum by electron-ion-plasma methods // High Temperature Material Processes 2014, 18, №4 311-317.
5. Электронно-ионно-плазменная модификация поверхности цветных металлов и сплавов / Под общ. ред. Н.Н. Коваля и Ю.Ф. Иванова - Томск: Изд-во НТЛ, 2016. – 312 с.

**РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ ВОДОРОДА В
МЕТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ МЕТОДОМ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ
ПРОНИЦАЕМОСТИ**

И.С. Саквин

Научный руководитель: В.Н. Кудияров

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Томск, e-mail: sakvinis@gmail.com

**THE DEVELOPMENT OF EXPERIMENTAL CHAMBER AND METHODOLOGICAL APPROACH
FOR GAS-PHASE HYDROGEN PERMEATION STUDY**

I.S. Sakvin

Scientific Supervisor: V.N. Kudiyarov

National Research Tomsk Polytechnic University,

Tomsk, e-mail: sakvinis@gmail.com

***Abstract.** In this work, the development of an experimental chamber and a technique for conducting experiments to study the permeation of hydrogen through metal membranes using an automated complex Gas Reaction Controller are realized. This complex makes it possible to carry out experiments to study the hydrogen permeation with the following parameters: hydrogen inlet pressure up to 50 atmospheres; the temperature in the chamber is from -30 °C to 1000 °C. The sample size is limited to 10 mm. The procedure for calculating the diffusion coefficient, based on the Fick equation, is presented in work. The study of the hydrogen permeation in a titanium alloy Ti-6Al-4V is presented in this research.*

Введение. Исследование взаимодействия водорода с металлами распространено во всем мире. Это обусловлено тем, что с одной стороны данное взаимодействие водорода с поверхностью и кристаллической решеткой металлов представляет интерес в области фундаментальных задач [1]. С другой стороны, существует ряд сложностей, связанных с накоплением, транспортировкой и последующим использованием водорода в качестве газовой смеси. Так же, существует необходимость защиты конструкционных материалов от пагубного воздействия водорода на их кристаллическую решетку. Для этого на поверхность образца наносят различные защитные покрытия [2], которые препятствуют проникновению водорода с объем материалов или производят поверхностную модификацию материалов различными методами [3].

Принцип работы. Экспериментальный комплекс GRC способен исследовать воздействие всевозможных процессов одностороннего наводороживания металлической мембраны на различные защитные покрытия, используя широкий спектр различных параметров насыщения, что помогает исследовать системы металл-водород еще более углубленно. Так же представляет интерес изучение сорбции - десорбции газов при их проницаемости через исследуемые фольги. Для этого экспериментальный комплекс оснащен масс-спектрометром, непосредственно находящийся в вакуумной системе данной установки.

Для исследования диффузии водорода используется следующий метод: после подготовки образца путем утончения до 100 мкм, он закрепляется между входным и выходным объемами. Далее

производится вакуумирование данных объемов и нагрев до рабочей температуры. После нагревания производится напуск водорода во входную часть камеры. При этом с выходной стороны с помощью масс-спектрометрической регистрации производится измерение давления водорода, прошедшего сквозь образец. В данном методе для нахождения параметров проницаемости водорода сводится к решению уравнения Фика [4] с граничными условиями первого рода:

$$J = -D \frac{\partial C}{\partial x},$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2},$$

$$\begin{cases} C|_{t=0} = 0, 0 \leq X \leq l \\ C|_{t \geq 0} = S_H \sqrt{P_0}, X = 0 \\ C|_{t \geq 0} = 0, X = l \end{cases}$$

На входной стороне образца мгновенно устанавливается концентрация, равная равновесной растворимости, а на выходной стороне в начальный момент времени концентрация водорода равна нулю.

Для потока на выходной стороне мембраны исходя из первого закона Фика имеем выражение:

$$J_{\text{вых}} = \frac{DS_H}{l} \left\{ 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \left[(-1)^n \exp\left(-\frac{D\pi^2 n^2}{l^2} t\right) \right] \right\}$$

Для расчёта коэффициента диффузии можно воспользоваться величиной стационарного потока, имеющего следующее выражение:

$$J_{\text{ст}} = J(t, l)|_{t \rightarrow \infty} = \frac{DS_H}{l}$$

Исследуя зависимость $J(t)$ можно выделить несколько характерных точек (рисунок 1), связанных с коэффициентом диффузии: это время прорыва t_{br} , которое определяется как точка пересечения касательной, проведенной в точке перегиба к $J(t)$ и осью абсцисс; и время полувоны $t_{0.5}$ за которое поток достигает половины стационарного состояния.

Для определения коэффициента диффузии можно воспользоваться любой из этих точек:

$$D = \frac{l^2}{19.9 t_{br}} = \frac{l^2}{7.2 t_{0.5}}$$

В случае совпадения коэффициента диффузии, рассчитанного с помощью различных характеристических времен, можно говорить о достоверности полученной зависимости $J(t)$ и о возможности описания экспериментальных условий используя приведенную краевую задачу.

Для построения графиков зависимости $J(t)$ необходимо представить давление на выходной стороне образца в виде потока водорода. Для этого воспользуемся уравнением Менделеева-Клапейрона:

$$pV = \nu RT, \quad (1)$$

где p – давление водорода в выходном объеме; V – объем выходной части камеры; ν – количество водорода; R – универсальная газовая постоянная; T – температура в камере.

Выразив ν из уравнения (1) получим:

$$\nu = \frac{pV}{RT}$$

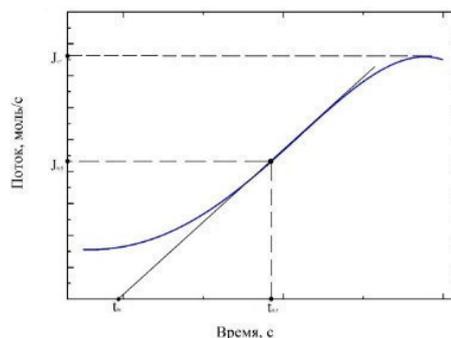


Рис. 1. Кривая проницаемости водорода сквозь металлическую мембрану

Поток водорода можно рассчитать, как поток газа, изменяющегося по времени. Зная количество водорода и время получаем:

$$J(t) = \frac{v}{\Delta t'}$$

где Δt – время, за которое происходит изменение количества водорода.

На рисунке 2 показан график зависимости потока водорода от времени. Можно выделить необходимые характерные точки и рассчитать коэффициент диффузии для данного материала.

С использованием описанной ранее методики полученный экспериментально коэффициент диффузии $7 \cdot 10^{-4} \text{ см}^2/\text{с}$. Полученные данные представлены в таблице 1.

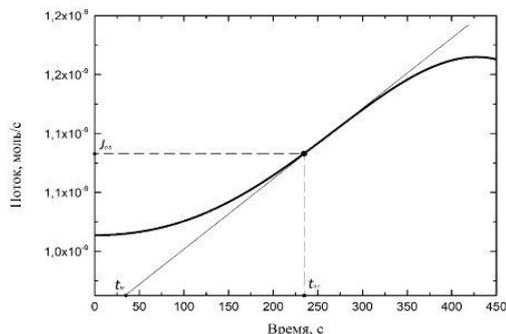


Рис. 2. График зависимости $J(t)$ для образца титанового сплава ВТ6

Таблица 1

Экспериментальные данные для титанового сплава ВТ6 при $T=923\text{K}$.

Параметр	Полученные данные
Время установления половины стационарного потока, с	240
Время прорыва, с	40
Коэффициент диффузии, $\text{см}^2/\text{с}$	$7 \cdot 10^{-4}$
Литературные данные коэффициента диффузии [5], $\text{см}^2/\text{с}$	$(7 \pm 1) \cdot 10^{-4}$

Заключение. В настоящей работе описана методика расчета коэффициента диффузии водорода в металлических образцах в широком диапазоне температур с использованием специально разработанной камеры. Решение уравнения Фика и применение уравнения Менделеева-Клайперона позволяет определять зависимость между временем проведения эксперимента и потоком водорода на выходной стороне. Анализ кривой прорыва водорода и определение характерных точек на кривой (время прорыва и время полуволены) позволяет посчитать коэффициент диффузии. В настоящей работе определен коэффициент диффузии для титанового сплава ВТ6, значение которого для температуры 923 К составило $7 \cdot 10^{-4} \text{ см}^2/\text{с}$, что подтверждается ранее проведенными исследованиями.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Switendick A. C. Band structure calculations for metal hydrogen systems // Zeitschrift für Physikalische Chemie. – 1979. – Т. 117. – №. 117. – С. 89-112.
2. Denis Levchuk, Harald Bolt, Max Dobeli, Simon Eggenberger, Beno Widrig, Jurgen Ramm. Al-Cr-O thin films as an efficient hydrogen barrier // Surface & Coatings Technology 202 (2008) 5043–5047.
3. Pushilina N.S., Stepanova E.N., Berezneeva E.V., Lider A.M., Chernov I.P., Ivanova S.V. Effect of pulsed electronbeam treatment and hydrogen on properties of zirconium alloy// Applied Mechanics and Materials Vol. 302 (2013) pp. 66–71.
4. И.У. Габис Метод концентрированных импульсов для исследования транспорта водорода в твердых телах // Журнал технической физики. – 1999.
5. G.W. Wille, J.W. Davis, Hydrogen in titanium alloys // McDonnell Douglas Astronautics Co., (1981)

**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНО-МОРФОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК
НАНОЧАСТИЦ ДИОКСИДА КРЕМНИЯ, ПОЛУЧЕННОГО ПЛАЗМЕННО-ДУГОВЫМ
МЕТОДОМ**

М.А. Семеновых¹, П.В. Космачев¹

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. В.А. Власов^{1,2}

¹Томский государственный архитектурно-строительный университет,

Россия, г. Томск, пл. Соляная, 2, 634003

²Национальный исследовательский Томский политехнический университет

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: pvkosm@gmail.com

**INVESTIGATION OF STRUCTURAL AND MORPHOLOGICAL CHARACTERISTICS OF SiO₂
NANOPARTICLES OBTAINED BY PLASMA-ARC METHOD**

M.A. Semenovych¹, P.V. Kosmachev¹

Scientific Supervisor: Prof., Dr. V.A. Vlasov^{1,2}

¹Tomsk State University of Architecture and Building, Russia, Tomsk, Solyanaya sq., 2, 634003

²National Research Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: pvkosm@gmail.com

***Abstract.** The paper shows results of structure and morphology research of silica nanopowder obtained from high silica raw materials from Russian fields, such as diatomite of Kamyshlovsk deposit (Sverdlovsk region), the quartzite of Chupinsk deposit (Republic of Karelia), quartz sand of Tugansk deposit (Tomsk region). The method of transmission electron microscopy (TEM) was used to study the morphology. BET analysis was used to study the surface. Synthesized agglomerated nanoparticles have a spherical shape and size distribution in the range of 10-300 nm.*

Введение. Получение наноматериалов функционального назначения является актуальной задачей современной науки [1-6]. Нанопорошок диоксида кремния востребован в различных областях промышленности и целесообразно разрабатывать новые методики его получения. В работе исследуются структурно-морфологические свойства наночастиц диоксида кремния, полученных плазменно-дуговым методом [7, 8], позволяющим использовать в качестве сырья доступные и экологичные природные высококремнеземистые материалы, который основан на физических процессах плавления и испарения под действием энергии низкотемпературной плазмы электродугового разряда с последующей конденсацией частиц.

Целью работы являлось исследование структурно-морфологических особенностей наноразмерного порошка диоксида кремния, полученного плазменно-дуговым методом из высококремнеземистого природного сырья.

Материалы и методы. В качестве сырья для получения нанопорошков диоксида кремния были использованы материалы природного происхождения из российских месторождений: кварцит

Чупинского месторождения в республике Карелия, обогащенный кварцевый песок Туганского месторождения в Томской области, диатомит Камышловского месторождения в Свердловской области.

Образцы полученных нанопорошков исследовали на просвечивающем электронном микроскопе CM 12 (Philips, Нидерланды), 120 кВ. Образец порошка предварительно диспергировался в спирте с использованием ультразвуковой ванны. Полученная дисперсия наносилась на медную сетку для микроскопии с аморфной пленкой углерода на поверхности и затем высушивалась. На основании полученных микрофотографий проводилось построение диаграммы распределения наночастиц по размерам по данным не менее чем для 1000 частиц с использованием программного обеспечения iTEM (Olympus, Japan). Анализ удельной поверхности проводился согласно методу БЭТ на установке NOVA 2000 (Quantachrome instruments, США).

Обсуждение результатов. ПЭМ-изображения наночастиц и соответствующие диаграммы распределения по размерам представлены на рисунке 1.

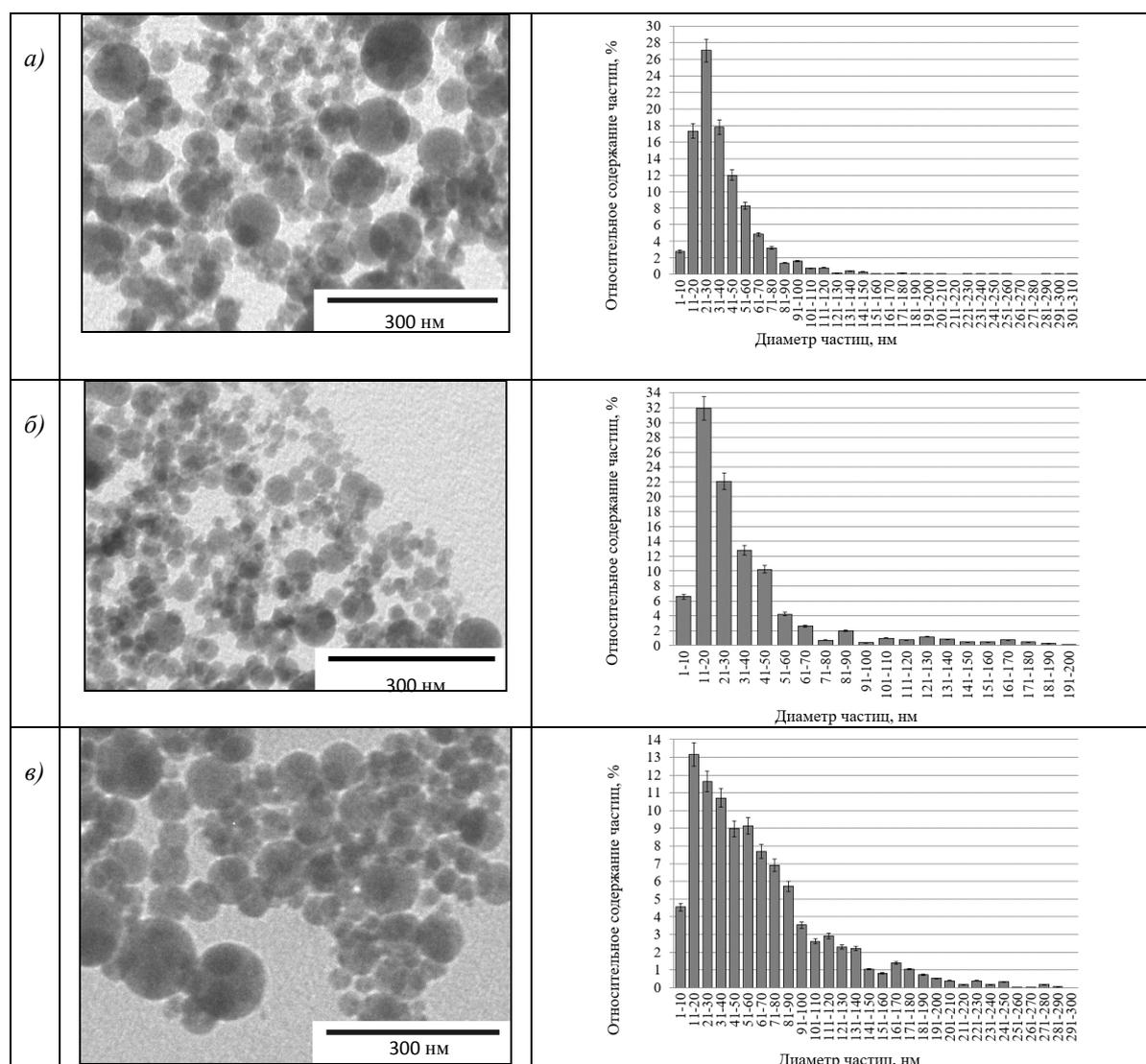


Рис. 1. ПЭМ-изображения и диаграммы распределения наночастиц диоксида кремния, полученных плазменно-дуговым методом из различных видов природного кремнеземистого сырья:
а) кварцита, б) обогащенного кварцевого песка, в) диатомита

По результатам микроскопии установлено, что полученные частицы имеют сферическую форму, полидисперсны, а их диаметр лежит в диапазоне 10-300 нм. Также наблюдалась сильная агломерированность частиц.

Проведенный анализ удельной поверхности полученных наночастиц показал значения 37–71 м²/г, что весьма характерно для приведенных выше распределений частиц по размеру.

Выводы. Таким образом, проведенными исследованиями установлено, что полученные плазменно-дуговым методом наночастицы подвержены сильной агломерации, имеют сферическую форму, с диаметрами в диапазоне от 10 до 300 нм. Полидисперсность получаемого нанопорошка является конкурентным преимуществом, например, в случае его применения в качестве упрочняющей модифицирующей добавки для изготовления строительных материалов [9].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hong, Franklin Chau-Nan; Yan, Cyun-Jhe Synthesis and characterization of silicon oxide nanoparticles using an atmospheric DC plasma torch // *Advanced powder technology*. – 2018. – Vol. 29 – N.2. – P. 220–229.
2. Gaijre, Bipin; Lecka-Czernik, Beata; Jayasuriya, Ambalangodage C. Injectable nanosilica-chitosan microparticles for bone regeneration applications // *Journal of biomaterials applications*. – 2018. – Vol. 32. – N. 6. – P.813–825.
3. Alvarez-Toral, Aitor; Fernandez, Beatriz; Malherbe, Julien et al Synthesis of amino-functionalized silica nanoparticles for preparation of new laboratory standards // *Spectrochimica acta part B-atomic spectroscopy*. – 2017. – Vol. 138. – P 1–7.
4. Ab Rahman, Ismail; Ghazali, Nor Ainon Maziah; Bakar, Wan Zaripah Wan et al Modification of glass ionomer cement by incorporating nanozirconia-hydroxyapatite-silica nano-powder composite by the one-pot technique for hardness and aesthetics improvement // *Ceramics international*. – 2017. – Vol. 43. – N. 16. – P. 13247–13253.
5. Cho, Y. -S.; Moon, J. -W. Collection of industrial oil using nanoparticles and porous powders of silica // *Archives of metallurgy and materials*. – 2017. – Vol. 62. – N. 2. – P. 1371-1375.
6. Колмыков В.И., Родионова И.Н., Воробьева О.В., Фомичёва Л.М. Исследование железных электрохимических композиционных покрытий с наполнителем из нанодисперсного диоксида кремния // В сборнике: Физика и технология наноматериалов и структур Сборник научных статей 3-й Международной научно-практической конференции. – 2017. – С. 127–132.
7. Kosmachev P., Vlasov V., Skripnikova N., Technological aspects of obtaining SiO₂ nanoparticles // *AIP Conf. Proc.* – 2017.– V. 1800.– P.020016-1–020016-5
8. Космачев П.В., Власов В.А., Скрипникова Н.К. Исследование структуры и свойств нанопорошка SiO₂, полученного плазменным методом из природных высококремнеземистых сырьевых материалов // *Изв. вузов. Физика*. – 2017. – Т. 60. № 2. – С. 46-50.
9. Космачев П.В., Демьяненко О.В., Власов В.А. и др. Композиционные материалы на основе цемента с нанодисперсным диоксидом кремния // *Вестник Томского государственного архитектурно-строительного университета*. – 2017. - № 4 (63). – С. 139-146.

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РАСЧЕТНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ
СОПРОВОЖДЕНИЯ РАБОТЫ ИРТ-Т**

А.А. Сливин

Научный руководитель: доцент, к.ф.-м.н. Ю.Б.Чертков

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: slivin-a@mail.ru

USE OF COMPUTATIONAL EXPERIMENTAL METHODS TO SUPPORT THE WORK OF IRT-T

A.A. Slivin

Scientific Supervisor: Associate Prof., PhD Yu. B. Chertkov

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: slivin-a@mail.ru

***Abstract.** In the present study, the possibility of using the TIGRIS program for simulation of the IRT-T reactor was considered. The results of calculations of the experimental critical states for the 109th campaign, performance evaluation of the regulator rod at a minimum controllable power level at the beginning and end of the campaign are presented. The energy production curve describing the dependence of the reactivity margin of the reactor on energy production is also presented. An experimental estimate was obtained from the dependence of the reactivity on the position of the regulatory rods. The discrepancy with the experiment did not exceed the limits specified in the program passport.*

Введение. Реактор ИРТ-Т является водо-водяным реактором бассейного типа на тепловых нейтронах с использованием в качестве замедлителя, теплоносителя и верхней биологической защиты дистиллированной воды. Реактор является мощным источником нейтронного и гамма-излучения и предназначен для проведения научно-исследовательских работ в области ядерной физики, физики твердого тела, радиобиологии, нейтронно-активационного анализа элементного состава веществ, легирования кремния с использованием реакторного излучения. На ядерном реакторе ИРТ-Т с 1977 по 1984 год и с 1998 по 2006 год были проведены масштабные реконструкции систем и оборудования. Реконструкции позволили поднять мощность реактора с 1 МВт до 6 МВт. Активная зона расположена в бассейне реактора на глубине 6,5 м и собирается из технологических сборок с высоким коэффициентом размножения и малой длиной миграции, что позволяет получить малые размеры активной зоны. В корпусе активной зоны имеется 56 ячеек для установки ТВС и бериллиевых блоков. Четыре центральные ячейки заняты бериллиевыми блоками, образуя ловушку нейтронов. В бериллиевых блоках располагаются вертикальные экспериментальные каналы [1].

Применение программы TIGRIS позволяет решать широкий круг эксплуатационных задач с минимальными временными затратами.

Цель настоящей исследовательской работы: оценка возможности расчетного моделирования реактора ИРТ-Т по программе TIGRIS.

Материалы и методы исследования. В настоящей работе моделирование реактора проводилось в программном комплексе TIGRIS [2]. Программа предназначена для трехмерного стационарного нейтронно-физического расчета реактора с топливом типа ИРТ. Применение данного программного комплекса позволяет решать следующие эксплуатационные задачи: выбор и обоснование загрузок, получение данных о характеристиках органов системы управления и защиты (СУЗ), контроль выгорания ТВС.

Основными расчетными данными, которые принимаются во внимание при эксплуатации, являются запас реактивности, характеристики органов СУЗ и распределение глубины выгорания по ТВС.

Библиотека констант для программы TIGRIS была подготовлена с использованием программного кода GETERA [3]. Расчет пространственно-энергетического распределения в программе GETERA основан на многогрупповом описании спектра нейтронов в области замедления и детальном описании спектра в области термализации. Пространственный расчет спектра нейтронов проводится с помощью метода вероятности первых столкновений.

Программный комплекс был разработан для проведения нейтронно-физического расчета стационарных состояний активной зоны реактора ИРТ МИФИ с учетом выгорания топлива, отравления бериллия. В качестве модели переноса нейтронов в программе использована трехмерная групповая диффузионная модель. Реактор ИРТ-Т имеет сходную конструкцию с ИРТ МИФИ, поэтому целесообразно рассмотреть применение программы TIGRIS для расчета ИРТ-Т.

Результаты расчетов. В качестве исходных данных для расчета использована информация о картограммах загрузок, значения интегральной энерговыработки между перегрузками, данные о положении органов регулирования (ОР) СУЗ в процессе кампании. Расчетное сопровождение работы реактора позволяет наряду с экспериментальными исследованиями оценивать текущее значение запаса реактивности и прогнозировать его дальнейшую работу.

В качестве примера ниже представлены расчетные и экспериментальные результаты для 109-ой кампании реактора ИРТ-Т. Перед началом работы реактора в эту кампанию была загрузка в него свежей порции топлива.

В таблице 1 приведены параметры всех трех пусков реактора в эту кампанию, проведенных с 14.11.17 по 22.01.18.

Таблица 1

Параметры пусков кампании 109

Пуск	Начало	Конец	ΔT , мин	P , МВт	ΔQ , МВт·час	t , °C	AP , м	КС-1, М	КС-2, м
109-1	14.11.17	17.11.17	4760	6,70	527	12,0	0,380	0,48	0,48
109-2	20.11.17	04.12.17	22130	6,95	2530	16,5	0,325	0,42	0,46
109-3	15.01.18	22.01.18	7410	6,00	740	22,5	0,290	0,32	0,31

где ΔT – длительность пуска (от минимально-контролируемого уровня мощности (МКУ) до конца);

P – среднее значение тепловой мощности на номинале;

AP , КС-1, КС-2 – положение соответствующих органов регулирования на МКУ. Положение КС-3 в этих пусках имело глубину погружения – 0 м.

Полная энерговыработка реактора за три пуска 109-ой кампании составила 4030 МВт·час тепловой энергии.

На рисунке 1 приведена кривая энергонаработки, описывающая зависимость запаса реактивности реактора ИРТ-Т от энергонаработки. Для моментов начала пусков приведена расчетная (по программе TIGRIS) зависимость этой величины. Экспериментальная оценка получена по зависимостям реактивности от положения органов регулирования.

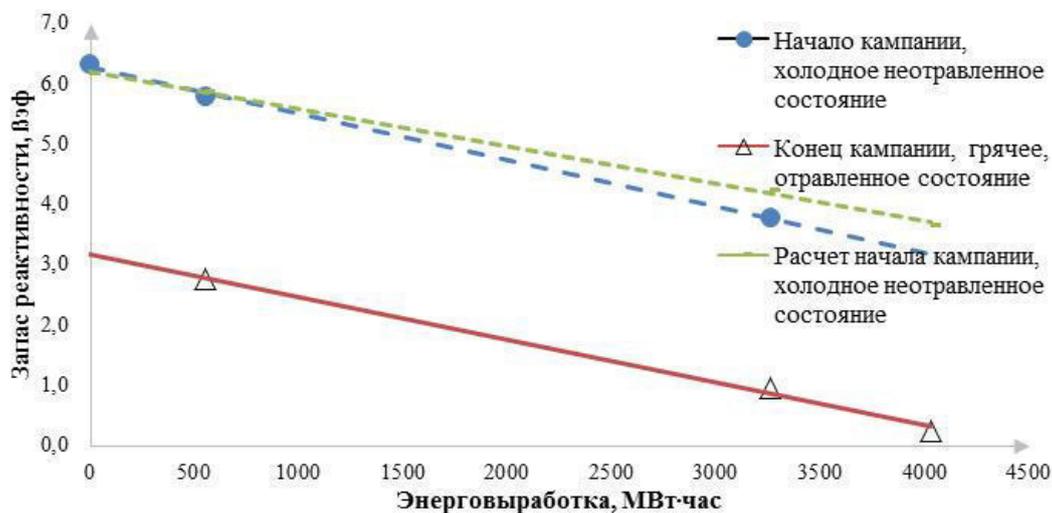


Рис. 1. Зависимость запаса реактивности реактора ИРТ-Т от энерговыработки в холодном (МКУ) и горячем (конец пуска) состоянии

При достижении полной энерговыработки реактора в 109-ю кампанию 4000 МВт·час запас реактивности реактора в «горячем» и отравленном ксеноном-135 и самарием-148 состоянии (характерном для окончания пуска) до нуля определяет момент окончания его работы в данную кампанию и необходимость проведения перегрузки топлива, при которой в реактор загружается «свежее» топливо. При расчетах реактора было получено, что экспериментальная и расчетная оценки темпа потери запаса реактивности в «холодном» и неотравленном состоянии практически совпадают друг с другом ($0,0007 \pm 0,0001 \beta_{эф}/\text{МВт}\cdot\text{час}$), что говорит об удовлетворительной работе расчетной модели и позволяет использовать ее для сопровождения работы реактора.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Варлачев В. А., Бузоверова Т.В., Гусаров О.Ф. и др. Лабораторный практикум на реакторе ИРТ-Т Часть 1. – Издательство ТПУ, 2003. – 96 с.
2. Щуровская М.В., Алферов В.П., Пинегин А.А., Хромов В.В. Разработка и верификация расчетной модели ИРТ МИФИ// Атомная энергия. – 1996. – Т. 81. Вып.5.
3. N. Belousov, S. Bichkov, Y. Marchuk et al. The code GETERA for cell and polycell calculations. Models and capabilities.-Proceedings of the 1992 Topical Meeting on Advances in Reactor Physics, March 8-11, 1992, Charleston, SC, USA.

**МОДЕЛИРОВАНИЕ КАНАЛИРОВАНИЯ ИОНОВ НИЗКИХ ЭНЕРГИЙ В УГЛЕРОДНЫХ
НАНОТРУБКАХ**А.В. Степанов

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н., Г.М. Филиппов

Чувашская государственная сельскохозяйственная академия,

Россия, г. Чебоксары, ул. К. Маркса, 29, 428000

E-mail: for.antonstep@gmail.com

SIMULATION OF LOW ENERGY ION LAYERING IN CARBON NANOTUBESA.V. Stepanov

Scientific Supervisor: Prof., Dr., G.M. Filippov

Chuvash State Agriculture Academy, Russia, Cheboksary, K. Marx str., 29, 428000

E-mail: for.antonstep@gmail.com

***Abstract.** This study simulates the passage of low-energy ions through carbon nanotubes in channeling mode. It is shown that taking into account the deformation of the wall of a carbon nanotube when calculating the interaction of ions with the nanotube wall leads to a decrease in ion energy losses in the case when the longitudinal velocity of the ion motion and perturbations of the nanotube wall are close in magnitude.*

Введение. Ионная имплантация через наношаблоны или маски является альтернативой использованию технологий литографии с применением фоторезиста при ионном травлении [1, 2]. Технология создания пористой или островковой пленки при помощи ионного пучка и наношаблонов широко используется в последнее десятилетие для техники локального осаждения металлов [3], сложных оксидов [4] и магнитных сплавов [5]. Кроме того, возможно осаждение на полимерные подложки, органические и самосборные монослойные пленки. Эта техника применяется для селективного осаждения материалов и для направленного травления полупроводников и диэлектриков, например, арсенида галлия [6], кремния, оксида кремния, нитрида кремния [7], и как масочная ионная литография [2].

Использование жгутов углеродных нанотрубок (УНТ) вместо масок обладает тем преимуществом, что позволяет управлять ионным пучком в трех измерениях при помощи манипулирования нанотрубками. Благодаря этому, появляется возможность направлять пучок ионов в труднодоступные места, например, при изготовлении микроэлектромеханических систем (МЭМС) или наноэлектромеханических систем (НЭМС), а также при создании полупроводниковых приборов со сложной пространственной архитектурой.

Целью данного исследования являлось исследование прохождения ионов низких энергий через углеродные нанотрубки в режиме каналирования. Задачи которые решались: 1. Изучение упругих возмущений стенки УНТ при каналировании в них частиц низких энергий. 2. Учет влияния возмущений стенки на движение частиц в УНТ

Методы исследования. При решении поставленных задач применялся метод молекулярной динамики, апробированный и широко применяемый для моделирования процессов взаимодействия

атомных частиц с твердым телом, а также применялись известные подходы к релаксации и термостатированию моделируемых атомных систем, методы анализа траекторий каналируемых частиц и способы описания систем в целом. Для расчетов использовался пакет LAMMPS [8], взаимодействие между атомами углерода в углеродной нанотрубке описывалось при помощи потенциала AIREBO [9-10], а между ионом и атомами углерода при помощи потенциала Ziegler-Biersack-Littmark (ZBL) [11]. Расчеты производились с использованием суперкомпьютерного центра Ломоносов МГУ им. М.В. Ломоносова [12].

Результаты. На основе расчета столкновения иона Ag^+ со стенкой УНТ (11,9) рассчитана деформация стенки. Поскольку при столкновении иона со стенкой происходит одновременное смещение сразу нескольких атомов углерода, возникают многочастичные эффекты. Показано, что учет дискретности стенки и движения атомов нанотрубки является более последовательным подходом по сравнению с методом непрерывного потенциала и методами, основанными на решении кинетических уравнений.

На примере ионов Ag^+ с энергией 100 эВ показано, что при движении иона с углами, близкими к критическим, после столкновения его со стенкой УНТ (10,10) возникают возмущения стенки – волны деформации (рис. 1), влияющие на движение каналируемой частицы. Движение каналируемой частицы после первого столкновения приводит к обмену энергией между возмущением стенки и частицей. В том случае, когда близки скорости их продольного движения, это приводит к уменьшению потерь энергии движущейся частицей при каждом столкновении со стенкой по сравнению со случаем движения без учета возмущений стенки нанотрубки [13].

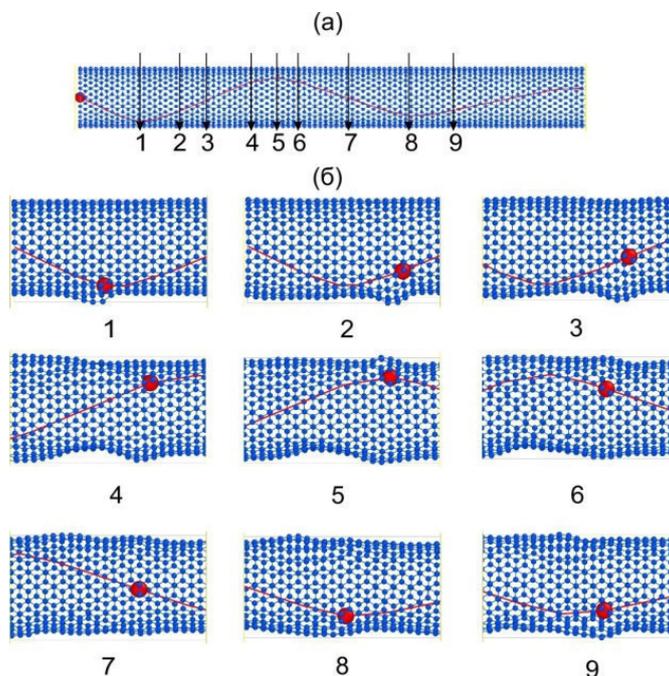


Рис. 1. (а) Траектория Ag^+ в фрагменте УНТ (10,10) длиной 14,3 нм с отмеченными на ней моментами времени. (б) Мгновенные «снимки» в моменты времени, указанные на рисунке 3 (а) фрагментов УНТ с изображениями участков траектории в соответствующие моменты времени. Текущее положение частицы указано кружком

Заключение. При подлете к стенке УНТ каналируемые частицы испытывают эффективное взаимодействие одновременно с несколькими атомами, при этом происходит упругая деформация стенки. Отсюда следуют неполная адекватность приближения непрерывного потенциала, модели бинарных столкновений и необходимость использования метода молекулярной динамики при моделировании процесса каналирования. Упругое возмущение стенки нанотрубки под действием каналируемой частицы оказывает влияние на движение этой частицы в том случае, если ее скорость близка к скорости распространения возмущения. При этом частица теряет меньше энергии, чем в случае движения в невозмущенной трубке.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Villanueva, L.G., et al., Localized Ion Implantation Through Micro // Nanostencil Masks. IEEE Transactions on Nanotechnology. – 2011. – Vol. 10, No.5– P. 940-946.
2. Pang, S.W., et al., Masked ion beam lithography for submicrometer gate length transistors. Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics Processing and Phenomena, 1987. 5(1): p. 215-218.
3. Brugger, J., et al., Quick & Clean: Advances in High Resolution Stencil Lithography // E nano newsletter. – 2007.– Vol. 8. – P. 22-28.
4. Villanueva, G.L., et al., Resistless Fabrication of Nanoimprint Lithography (NIL) Stamps Using Nano-Stencil Lithography // Micromachines. – 2013. – Vol. 4, No.4. – P.370-377.
5. Rodriguez, A.F., et al., Permalloy thin films exchange coupled to arrays of cobalt islands // Applied Physics Letters. – 2006. – Vol. 89, No.14. – P. 142508.
6. Pang, S.W., et al., Pattern transfer by dry etching through stencil masks // Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics Processing and Phenomena. – 1988. – Vol. 6, No.1 – P. 249-252.
7. Villanueva, G., et al., Etching of sub-micrometer structures through Stencil // Microelectronic Engineering. – 2008.Vol. 85, No. 5–6. – P. 1010-1014.
8. Plimpton, S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics / S. Plimpton // Journal of Computational Physics. – 1995. – Vol. 117, № 1. – P. 1-19.
9. Stuart, S. J. A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions / S. J. Stuart, A. B. Tutein, J. A. Harrison // The Journal of Chemical Physics. – 2000. – Vol. 112, No 14. – P. 6472-6486.
10. A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons / D. W. Brenner, O. A. Shenderova, J. A. Harrison., S. J. Stuart, B. Ni, S. B. Sinnott // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2002. – Vol. 14, No 4. – P. 783.
11. Ziegler, J. F. The Stopping and Range of Ions in Matter. / J. F. Ziegler, J. P. Biersack, U. Littmark; Vol. 1, ed. by J.P. Ziegler. – New York: Pergamon, 1985. – 321 p.
12. Sadvnichy V., Tikhonravov A., Voevodin VI., et al., Contemporary High Performance Computing: From Petascale toward Exascale. – Boca Raton: CRC Press, 2013. – 283 p.
13. Степанов, А. В. Влияние упругих возмущений стенки углеродной нанотрубки на каналирование в ней медленных атомных частиц / А. В. Степанов // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2015. – №8. – С. 34-43.

**СОЗДАНИЕ МОДЕЛИ ЭЛЕКТРОННЫХ И ФОТОННЫХ ПУЧКОВ ЛИНЕЙНОГО
УСКОРИТЕЛЯ ELEKTA SYNERGY В СИСТЕМЕ ПЛАНИРОВАНИЯ PLUNC**

Я.Н. Сутыгина, Е.С. Сухих

Научный руководитель: старший преподаватель каф. ПФ, к.ф.-м.н. Е.С. Сухих

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: yana.sutygina@mail.ru

**MODELING OF ELECTRONS AND PHOTONS BEAMS OF LINEAR (PLANAR)
ACCELERATOR ELEKTA SYNERGY IN MODELLING SYSTEM PLUNC**

Y.N. Sutygina, E.S. Sukhikh,

Scientific Supervisor: PhD, E.S. Sukhikh,

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: yana.sutygina@mail.ru

***Abstract.** The article presents the experience of creating a model of beam in the non-commercial 3D Plan-UNC radiation treatment planning system (PLUNC). The results of dosimetry for electron and photon beams of the Elekta Synergy linear accelerator are presented.*

Введение. Сегодня лучевая терапия является одним из основных методов лечения различных видов онкологических заболеваний и применяется не менее чем у 80 % пациентов. Первостепенной задачей лучевой терапии является соблюдение основного радиотерапевтического принципа: максимальное повреждающее действие на опухоль и уменьшение лучевой нагрузки на окружающие здоровые ткани. Для оптимального лечения доза излучения должна доставляться с высокой точностью и как можно более равномерно (не ниже -5% и не выше +7%), однако это требование не всегда выполнимо по техническим причинам. Т.к. все процедуры для введения в эксплуатацию ускорителя и других радиотерапевтических аппаратов должны выполняться с точностью лучше, чем 5% [1]. В связи с этим, расчет планов облучения осуществляется с использованием специальных программ планирования лучевой терапии.

Томский политехнический университет и Томский областной онкологический диспансер занимаются подготовкой магистров медицинской физики в области клинической лучевой терапии. Одной из основных обязанностей медицинских физиков в отделениях лучевой терапии является дозиметрическое планирование и гарантия качества различных видов лучевой терапии. Студентам для отработки навыков планирования, сравнения методик и оптимизации планов лучевой терапии необходимо использовать специальные планирующие системы. Большинство программ для планирования лучевой терапии являются коммерческими (XiO и Monaco, Eclipse и т.д). Стоимость коммерческих программных продуктов очень высока, даже в отделениях лучевой терапии имеется лишь несколько рабочих станций. Однако, основным недостатком большинства коммерческих систем является не только высокая стоимость, но и ограничение в доступе к исходному коду программирования, что приводит к значительно ограниченной клинической и технологической гибкости, имеющей важное

значение для образовательных и исследовательских учреждений. В данной работе использована образовательная система планирования PLUNC. Данная система позволяет проводить планирование конвенциональной лучевой терапии с использованием блоков и клиньев, 3D-конформную лучевую терапию, а также IMRT фотонными пучками энергией 6 МэВ и 15 МэВ. PLUNC является программным обеспечением, разработанным усилиями специалистов института Северной Каролины (США) с открытым, адаптируемым и расширяемым кодом, что позволяет создавать модели фотонных и электронных пучков излучения линейных ускорителей, на основе измеренных дозиметрических данных [2]. Целью данной работы является создание модели электронных и фотонных пучков линейного ускорителя Elekta Synergy, установленного в Томском областном онкологическом диспансере, в системе планирования PLUNC.

Материалы и методы исследования. Высокоэнергетический линейный ускоритель Elekta Synergy разработан для подачи лечебных фотонных пучков с энергией 6МВ,10МВ,15МВ и электронных пучков с энергией 6-18 МэВ для широкого диапазона стандартных и новейших методов лучевой терапии. Создание модели пучка в системе планирования PLUNC осуществляется путем ввода характеристик терапевтической установки, а также дозиметрических данных пучка в систему в соответствии с рекомендациями, описанными в руководстве пользователя системы.

Проведена клиническая дозиметрия фотонных и электронных пучков линейного ускорителя Elekta Synergy в рамках международных дозиметрических протоколов по клинической дозиметрии TRS-398, TG-51, TG-25 и рекомендаций, прилагаемых к системе PLUNC. Измерения проведены для фотонов с энергий 6 и 10 МэВ и для электронов с энергией 6 и 9 МэВ при помощи анализатора дозного поля IBA Blue phantom. С помощью анализатора дозного поля определяется пространственное распределение дозного поля в поглощающей среде - воде, близкой по своим характеристикам к тканям тела человека, при разных режимах работы терапевтического аппарата. Внутри водного фантома находится подвижный механизм для трехмерного сканирования, т.е. перемещения детектора излучения в пределах измеряемого объема в режимах непрерывного и пошагового сканирования. Управление механизмом осуществляется специализированным блоком управления с двухканальным электрометром Dose1, через соединительный кабель управления. Измерения проведены для фотонов при помощи цилиндрических ионизационных камер CC13, CC01 и FC65-G, а для электронного пучка при помощи ионизационной камеры PPC40 [3].

Результаты исследований. Для создания модели пучка проведены измерения поперечных и продольных профилей пучка для размера полей от 2x2 до 40x40 см² на различных глубинах d_{max} и глубинное распределение дозы на оси пучка (PDD). Так же для моделирования клиновидных фильтров проведены измерения поперечных профилей и глубинных распределений дозы на оси фотонного пучка для ряда комбинаций полей (5x5, 10x10 и 20x20 см²) и углов клина (15°, 30°, 45° и 60°).

На рисунках 1 и 3 представлены кривые глубинного распределения относительной поглощённой дозы электронного и фотонного пучка линейного ускорителя с энергией 6 МэВ для ряда полей. На рисунках 2 и 4 представлены продольные кривые распределения относительной поглощённой дозы электронов и фотонов с энергией 6 МэВ ускорителя Elekta Synergy для поля 20×20 см на различной глубине.

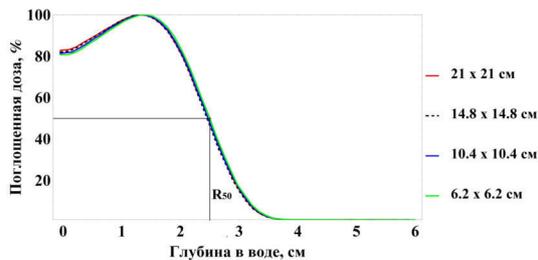


Рис. 1. Кривые глубинного распределения относительной поглощённой дозы электронов с энергией 6 МэВ ускорителя Elekta Synergy для ряда полей

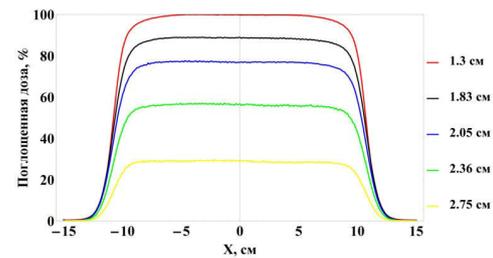


Рис. 2. Кривые распределения относительной поглощённой дозы электронов с энергией 6 МэВ ускорителя Elekta Synergy для поля 21×21 см на различной глубине

По полученным данным результатам проведена оценка плоскостности и симметричности полей на глубинах максимальной дозы и на уровне 80% дозы, значения плоскостности и симметрии не выходят за рамки допустимой погрешности.

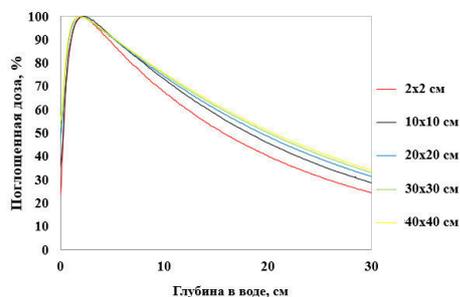


Рис. 3. Кривые глубинного распределения относительной поглощённой дозы фотонов с энергией 6 МэВ ускорителя Elekta Synergy для ряда полей

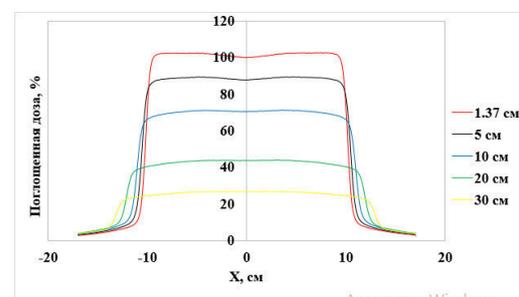


Рис. 4. Кривые распределения относительной поглощённой дозы фотонов с энергией 6 МэВ ускорителя Elekta Synergy для поля 20×20 см на различной глубине

Для создания моделей электронных и фотонных пучков линейного ускорителя Elekta Synergy в системе планирования PLUNC проведено форматирование типа и загрузка полученных в результате эксперимента дозиметрических данных в код программы. Осуществлен ввод данных характеристик терапевтической установки, оптимизация полученной модели.

Заключение. Таким образом, проведено измерение дозиметрических данных фотонных и электронных пучков линейного ускорителя Elekta Synergy. Создана виртуальная модель фотонных и электронных пучков в системе планирования PLUNC. В дальнейшем планируется проведение верификации полученных моделей и сравнение полученных результатов с коммерческими системами дозиметрического планирования XIO и Monaco.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Труды 103 МКРЗ / Под ред. М.Ф. Киселёва и Н.К.Шандалы.. – М.: ООО ПКФ «Алана», 2009. – 67 с.
2. Tewell M.A., Adams R. The PLUNC 3D treatment planning system: a dynamic alternative to commercially available systems // Med. Dosim. no. 29(2), (2004), p. 134-138.
3. Определение поглощённой дозы при дистанционной лучевой терапии: Международные практические рекомендации по дозиметрии, основанные на эталонах единицы поглощённой дозы в воде, №398. - Вена, 2004. - стр. 54-63.

**АНАЛИЗ УПРУГО-НАПРЯЖЕННОГО СОСТОЯНИЯ ГРАНИЦ НАНОКРИСТАЛЛОВ В
РАМКАХ ДИСКЛИНАЦИОННОГО ПОДХОДА**И.И. Суханов

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. А.Н. Тюменцев
Национальный исследовательский Томский государственный университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050
E-mail: suhanii@mail.ru

**ANALYSIS OF THE ELASTIC-STRESSED STATE OF NANOCRYSTALS BORDERS WITHIN
THE FRAMEWORK OF THE DISCLINATION APPROACH**I.I. Sukhanov

Scientific Supervisor: Prof., Dr. A.N. Tyumentsev
Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050
E-mail: suhanii@mail.ru

Abstract. *The results of a theoretical analysis of the elastic-stressed state and the distribution of elastic energy in nanostructured metallic materials in the vicinity of nanograin boundaries with a high density of partial disclinations are presented. The features of the distribution of the stress fields of disclination grain-boundary configurations as a function of the size of nanograins are determined taking into account the superposition of these stresses during the screening of disclination pile-ups. It's found that the maximum values of the main components of the stress tensor are achieved only in the disclination planes $P \approx E/25$, and the gradients of these stresses are characterized by the maximum values at the nodal points $\partial P/\partial x \approx 0,08 E \text{ nm}^{-1}$. It's shown that the local energy maxima are a characteristic feature of the distribution of the specific elastic energy of these configurations, which can be the cause of the physical broadening of the nanograin boundaries.*

Введение. Границы зерен являются одним из важнейших элементов дефектной субструктуры поликристаллических материалов. Они определяют многие фундаментальные свойства металлов, такие как, прочность и пластичность. Особую важность они приобретают в процессах пластической деформации разрушения нанокристаллических материалов.

В работе [1] предложена структурная модель субмикроструктуры, учитывающая наличие структурные состояния с высокой континуальной плотностью дефектов (дислокаций и дисклинаций) в объеме и на границах субмикроструктур. В этой модели, помимо областей с высокой континуальной плотностью дефектов или высокими значениями кривизны и ротора кривизны кристалла, имеется высокая плотность границ, заполненных плоскими скоплениями непрерывно распределенных частичных дисклинаций. В настоящей работе на основе этой модели в рамках континуального подхода проводится теоретическое исследование особенностей упруго – напряженного состояния и распределения упругой энергии на наномасштабном структурном уровне.

Материалы и методы исследования. В рамках континуального подхода использовалась структурная модель границ нанозерен, в которой дисклинационный заряд распределен и скомпенсирован по контуру зерна гексагональной формы. В качестве носителей такого заряда были выбраны частичные

клиновые дисклинации. Расчет полей напряжений и энергий проводился в программной среде Maple 17 с использованием явного вида тензора напряжений таких дисклинаций [2].

Результаты. Особенности распределения зернограницных дисклинаций определяются двумя условиями (рисунок 1):

- гексагональное зерно задается системой плоских дисклинационных скоплений разных знаков, формирующих дипольные конфигурации;
- пространственное распределение дисклинаций носит нерегулярный характер и описывается тремя областями: последовательное равномерное увеличение/уменьшение расстояния между дефектами (область I/III рисунок 1), эквидистанционная область II с фиксированным расстоянием между зернограницными дисклинациями.

Выбор такого дисклинационного распределения обусловлен наличием высоких значений кривизны и ротора кривизны кристаллической решетки. Величина вектора Франка в ходе вычислительных экспериментов не менялась и составляла $\omega \approx 1^\circ$.

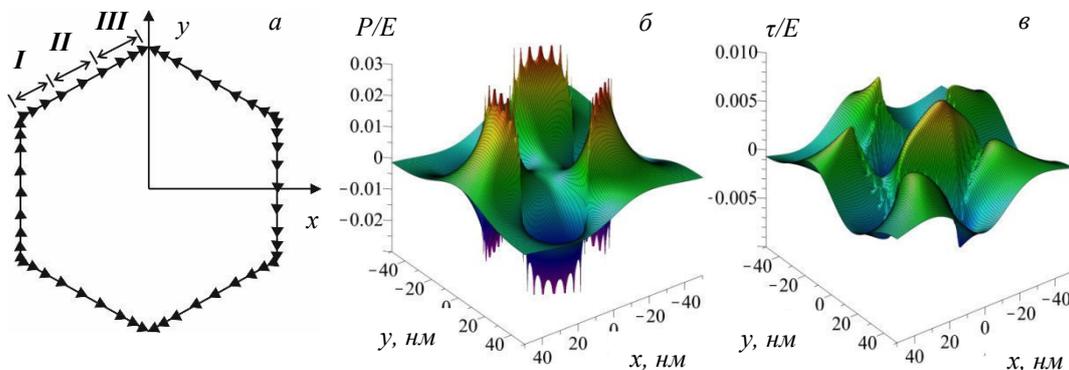


Рис. 1. Схема распределение зернограницных дисклинаций в зерне гексагональной формы (а); пространственное распределение давления $P = (\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz})/3$ (б) и компоненты σ_{xy} тензора напряжений (в) зерна с размерами $R = 60$ нм

Теоретический анализ упруго – напряженного состояния нанозерна размером $R = 100$ нм показал, что поля напряжений характеризуются сложной топологией и локализованы в области расположения частичных дисклинаций (рисунок 2 а). Это является результатом их суперпозиции при экранировке дисклинационных скоплений. Как видно из рисунка 2 а, максимальные значения главных компонент тензора напряжений достигаются в плоскостях залегания дисклинаций $P = Tr(\sigma_{ij})/3 = (\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz})/3 \approx E/25$, при этом градиенты напряжений характеризуются максимальными величинами в узловых точках $\partial P/\partial x \approx 0,08 E \text{ нм}^{-1}$ (E – модуль Юнга). Другая важная особенность поля напряжений нанозерен в рамках данной дисклинационной модели заключается в том что, значительная часть сдвиговых компонент тензора напряжений локализована внутри физического размера зерна (рисунок 2 б).

При уменьшении размера зерна величина полей напряжений уменьшается (рисунок 2 в, г): для нанозерна размером $R = 60$ нм диагональные компоненты тензора напряжений достигают значений $P \approx E/40$, сдвиговые – $\sigma_{xy}/E \approx 0,01$.

Для оценки устойчивости дисклинационной модели дефектной субструктуры границы нанозерна проведен сравнительный анализ распределения удельной упругой энергии в зависимости от его размера. Результаты такого анализа представлены на рисунке 3. Из этих расчетов следует, что в рамках этой модели рассматриваемые конфигурации зернограничных дисклинаций обладают локальным энергетическим максимумом, который является характерной особенностью распределения удельной упругой энергии. Этот максимум, во-первых, можно интерпретировать как своеобразный энергетический барьер, в котором локализуется значительная часть упругой энергии; во-вторых, приводит к увеличению физической ширины границы нанокристалла. Величина максимума зависит от размера зерна и для зерна $R = 60$ нм составляет $(W/L)_{max} = 0,016$ Дж/нм² (рисунок 3 б кривая 1).

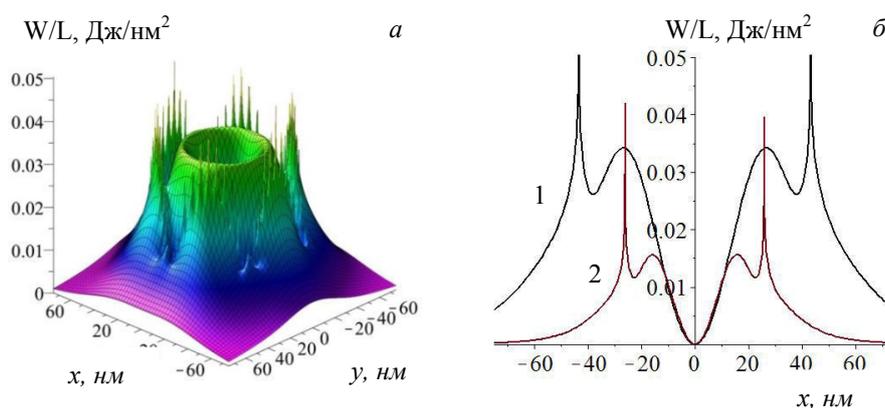


Рис. 2. Пространственное распределение упругой энергии в зерне размером $R = 100$ нм (а) и сравнение его проекций (б) на плоскость $y = 0$ для зерна $R = 100$ нм (кривая 1) и $R = 60$ нм (кривая 2)

Заключение. На основе теоретического анализа упруго – напряженного состояния дисклинационных зернограничных конфигураций выявлены особенности распределения полей напряжений в них в зависимости от размера зерен нанокристаллов как результат суперпозиции этих напряжений в процессе экранировки дисклинационных скоплений. Характер и условия распределения полей напряжений и энергий свидетельствует о важной роли масштабного фактора, который определяет как геометрию границ зерен, так и особенности энергетического максимума. Предполагается, что такой максимум может быть причиной увеличения физической ширины границ зерен нанокристаллов с высокой плотностью частичных дисклинаций.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №17-19-01374).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Тюменцев А.Н. Структурные состояния с высокой кривизной кристаллической решетки в субмикроструктурных и нанокристаллических металлических материалах / А.Н. Тюменцев, И.А. Дитенберг // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2011. – Т. 54, № 9. – С. 26–36.
2. Владимиров В. И. Дисклинации в кристаллах / В.И. Владимиров, А.Е. Романов //– Л.: наука, 1986. – 223 с.

**ПОЛЯ НАПРЯЖЕНИЙ И ЭНЕРГИИ ДЕФЕКТОВ ДИСКЛИНАЦИОННОГО ТИПА В ЗОНАХ
ЛОКАЛИЗАЦИИ УПРУГИХ ДИСТОРСИЙ**

И.И. Суханов

Научный руководитель: профессор, д. ф.-м. н. А.Н. Тюменцев
Национальный исследовательский Томский Государственный университет,
Россия, г.Томск, пр. Ленина, 36, 634050
E-mail: suhanii@mail.ru

**FIELDS OF STRESSES AND ENERGY OF DEFECTS OF DISCLINATIONAL TYPE IN ZONES
OF LOCALIZATION OF ELASTIC DISTORTIONS**

I.I. Suhanov

Scientific Supervisor: Prof., Dr. A.N. Tyumentsev
Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenina ave., 36, 634050
E-mail: suhanii@mail.ru

***Abstract.** Dipole and quadrupole configurations of wedge partial disclinations are considered. It's shown that the size of local internal stresses and their gradients can reach $P \approx E/50$ and $\partial P/\partial x \approx 0.02 \text{ nm}^{-1}$ respectively. The calculating experiment demonstrates that high values of local internal stresses and their gradients in the field of elastic distortions can be described by multipole configurations of partial disclinations like dipole/quadrupole. Mechanism of deformation localization in the region of elastic distortions is proposed.*

Введение. Одним из интенсивно развивающихся направлений физики прочности и пластичности является создание и исследование наноструктурных металлических материалов. К настоящему времени накоплены экспериментальные результаты, которые демонстрируют, что основным фактором, отвечающим за формирование в таких материалах уникальных физических и механических свойств, являются особенности их неравновесной структуры [1].

К сожалению, практически отсутствуют работы по теоретическому описанию и моделированию таких неравновесных состояний, которые оказывают непосредственное влияние, как на эволюцию микроструктуры, так и на уровень физико-механических свойств наноструктурных металлических материалов в различных условиях внешних воздействий.

В настоящей работе проведено моделирование дипольной и квадрупольной дисклинационных конфигураций в области упругих дисторсий и последующий теоретический анализ полей локальных внутренних напряжений и энергий этих конфигураций.

Материалы и методы исследования. Вычислительный эксперимент проводился в программной среде Maple 17. Моделирование полей напряжений проведено с использованием явного вида компонент тензора напряжений [2]. Для удобства расчета рассматривались только клиновые компоненты дисклинаций. Визуализация полей напряжений и пространственного распределения упругой энергии произведена с помощью графических средств пакета Maple 17. Анализ энергии проведен с использованием численного интегрирования по методу Монте Карло с точностью $\varepsilon = 0,005$.

Результаты. Для анализа процессов зарождения указанных выше нанополос и связанных с ними нанодиполей частичных дисклинаций значительный интерес представляют результаты работы [1], в которой установлено, что локализация деформации с формированием нанополос переориентации размерами менее 10 нанометров развивается уже в области упругой деформации. Они зарождаются на границах нанозерен динамической рекристаллизации никеля и представляют собой нанополосы с непрерывным характером разориентировок и упругой кривизной кристаллической решетки сотни град/мкм. На фронте их распространения, помимо нанодиполей частичных дисклинаций, обнаружены более сложные дисклинационные конфигурации – мультиполи или ансамбли взаимосвязанных квадруполей.

Теоретическая оценка величины давления $P = (\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33})/3$ в зоне нанодиполя клиновых дисклинаций с экспериментально наблюдаемыми значениями $l \approx 6$ нм и $\varphi \approx 1^\circ$ показала, что максимальных значений ($P \approx \pm E/50$) эта величина достигает в плоскости залегания нанодиполя (рис. 1 а). Важной особенностью поля напряжений нанодиполя является также то, что максимальное значение тангенциальной компоненты тензора напряжений, под действием которой осуществляется сдвиг, находится перед фронтом его распространения. По-видимому, этим объясняется формирование в этой области квадруполя частичных дисклинаций, превращающего движущийся диполь в мультипольную конфигурацию.

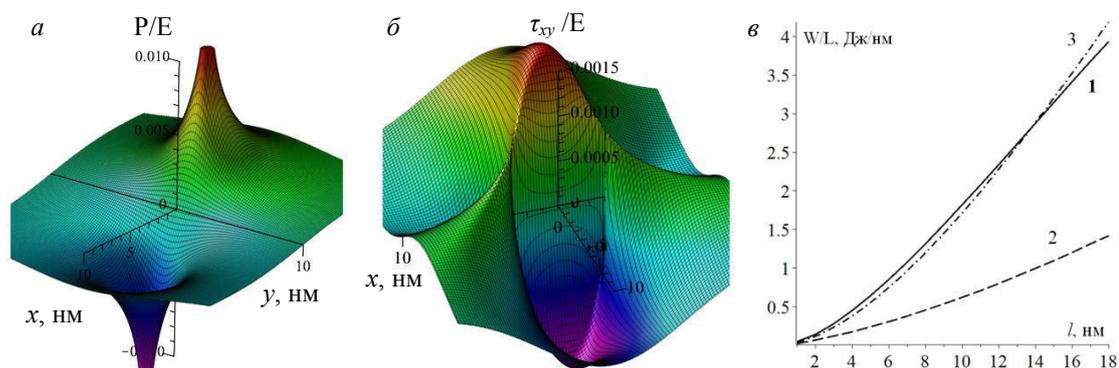


Рис. 1. Пространственное распределение давления (а) и компоненты τ_{xy} тензора напряжений (б) нанодиполя частичных клиновых дисклинаций; удельная упругая энергия нанодипольной (кривая 1), мультипольной (кривая 2) дисклинационных конфигураций и краевой дислокации с вектором Бюргерса $b \approx l \omega$ (кривая 3) (в)

Расчеты полей напряжений и энергий мультипольных конфигураций показали, что результатом суперпозиции и более интенсивных эффектов экранировки полей напряжений в ансамбле нанодиполей является увеличение градиентов и уменьшение величины локальных напряжений в окрестности мультиполя. Следствием такого уменьшения является кратное (примерно в 3 раза) снижение энергии дисклинационной конфигурации (рис. 1 в, кривая 2). Такое снижение, совместно с максимумом сдвиговой компоненты напряжений перед движущимся нанодиполем делает его эффективным концентратором напряжений, стимулирующим локализованный характер развития упругой деформации.

Как видно, нанодиполи частичных дисклинаций являются неустойчивыми конфигурациями. При этом структура области заторможенного упругого сдвига с поворотом как дефекта упруго деформированной среды может быть представлена не только нанодиполем частичных дисклинаций, но и ансамблем взаимосвязанных квадруполь. Механизм продвижения такого дефекта при формировании нанополосы локализации деформации в этой области можно представить как многократную последовательность следующих структурных трансформаций:

- образование в зоне перед фронтом распространения нанополосы квадруполь частичных дисклинаций со значительным снижением энергии дефекта;
- объединение этого квадруполь с нанодиполем, движущимся под действием приложенных напряжений.

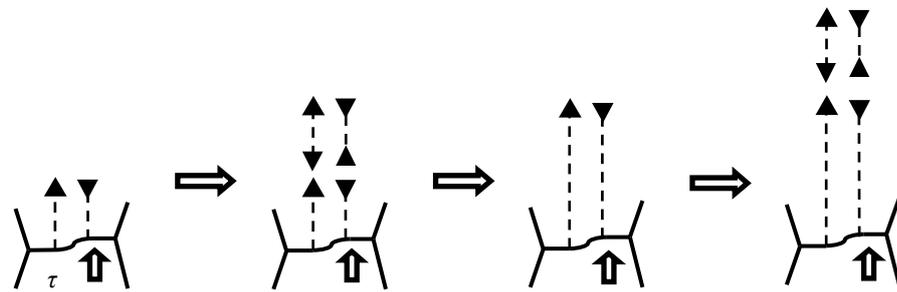


Рис. 2. Схема движения нанодиполя частичных дисклинаций

Заключение. Характерной особенностью зон локализации упругих дисторсий являются высокие значения диагональных компонент тензора напряжений с максимальными значениями в плоскостях залегания нанодиполей $P \approx E/50$.

Обнаружено значительное (кратное) уменьшение энергий мультипольных конфигураций по сравнению с нанодипольными в широком интервале их геометрических размеров. Такое снижение, совместно с максимумом сдвиговой компоненты напряжений перед движущимся нанодиполем делает его эффективным концентратором напряжений, стимулирующим локализованный характер развития упругой деформации.

Предложен механизм локализации деформации в области упругих дисторсий, представляющий собой квазипериодическую последовательность формирования и релаксации дисклинационных ансамблей различного типа с периодическим изменением энергии дефекта.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №17-19-01374).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Тюменцев А.Н. Структурные состояния с высокой кривизной кристаллической решетки в субмикрорекристаллических и нанокристаллических металлических материалах / А.Н. Тюменцев, И.А. Дитенберг // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2011. – Т. 54, № 9. – С. 26–36.
2. Владимиров В. И. Дисклинации в кристаллах / В.И. Владимиров, А.Е. Романов //– Л.: наука, 1986. – 223 с.

**УСТАНОВКА ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТОВ ДИФФУЗИИ ВОДОРОДА МЕТОДОМ
ВИХРЕВЫХ ТОКОВ В МЕТАЛЛАХ ПРИ ИХ НАВОДОРОЖИВАНИИ**

Сюй Шупэн, Чжоу Хао

Научный руководитель: профессор В.В. Ларионов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: 1208502516@qq.com

**A LABORATORY DEVICE FOR MESURING THE METHOD OF EDDY CURRENTS THE
DIFFUSION COEFFICIENT OF HYDROGEN IN METALS HYDROGENATION**

Xu Shupeng, Zhou Hao

Scientific Supervisor: Prof., Dr. V.V. Larionov

Tomsk Polytechnic University, Russia, Lenin str., 30, 634050

E-mail: 1208502516@qq.com

***Abstract.** A method is proposed for measuring the diffusion coefficient of hydrogen in a membrane made of a titanium alloy VT1-0 based on the use of eddy currents and an installation for its implementation is described. An eddy current sensor is located on the membrane, which is the wall of the electrolytic cell. The diffusion process is measured under the conditions of formation of titanium hydrides. The formation of titanium hydrides during hydrogenation is monitored over time by measuring the diffraction spectra. The results of the measurement of the diffusion coefficient of hydrogen by the proposed method are given in the conditions of formation of titanium hydrides in the membrane. The results can be used to determine the diffusion coefficients of hydrogen in various structural materials, in space technology, nuclear power engineering, in products subjected to hydrogenation during operation.*

Введение. Известно, что по значениям коэффициента диффузии водорода оценивают скорости поглощения водорода и дегазации металла. Для строго описания диффузии водорода в металлах исследуют закономерности взаимодействия атомов водорода как друг с другом, так и с металлической матрицей. Растворенный атом водорода является точечным дефектом кристаллической структуры, образующийся в результате перехода атома Н из внешней среды в междоузлие кристаллической решетки металла. Такая особенность связана с весьма малым атомным объемом водорода, а также с диссоциацией молекулы водорода (с небольшими энергиями активации) на отдельные атомы как при попадании в металл [1-5], так и на его поверхности. При больших концентрациях водорода образуются гидриды металла [3, 4]. На величину коэффициента диффузии влияют границы зерен, пористость материала, напряжения и динамические нагрузки, возникающие в металле [1, 5].

Целью данной работы является разработка чувствительной методики и прибора для исследования и контроля диффузии водорода в условиях образования гидридов в деталях, подвергаемых водородному поражению.

Материалы и методы. Функциональная схема установки приведена на рис. 1. Для насыщения мембраны 1 водородом использована электролитическая ячейка 2, в которую заливают электролит.

Водород, попадающий из электролита в мембрану, диффундирует в горизонтальном направлении. В ячейку заливают электролит – 0.1 М раствор серной кислоты, в который погружены анод 3 и исследуемый образец (мембрана) 1 – катод. В качестве измерителя использован прибор магнитный спектрометр ЗМА-II (производство Германия, Саарбрюккен), который включает вихретоковый датчик 4 и измеритель напряжения 5. На анод и мембрану электролитической ячейки подают постоянное напряжение, обеспечивающее плотность тока в пределах от 0.1 до 1 А/см², от источника тока 6 DC SUPPLY HY 3002. Влияние изменения структуры титановой мембраны при измерении коэффициента диффузии при её насыщении водородом контролируется дифрактометром PDIFF Beamline.

Экспериментальная часть. Ниже приведены результаты исследований диффузии водорода через мембрану, изготовленную из листа титанового сплава ВТ1-0. Коэффициенты диффузии определяли тайм-лаг-методом по формуле Бэррера [3]

$$t = h^2 / 6D, \quad (1)$$

где t – время установления стационарного потока водорода через металлическую мембрану, h – толщина металлической мембраны, D – коэффициент диффузии. Глубина проникновения δ вихревого тока в металл является функцией электропроводности металла σ , частоты вихревого тока ω и магнитной проницаемости металла μ [3].

$$\delta = \frac{1}{\sqrt{\omega\mu\sigma/2}} \quad (2)$$

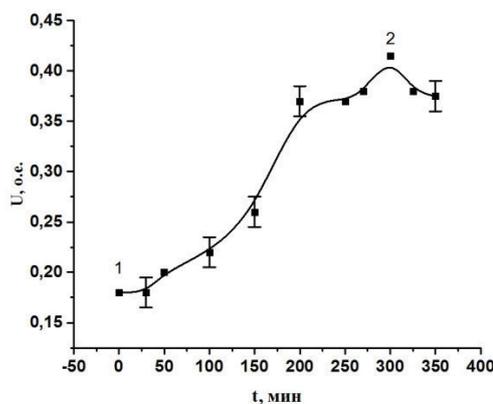
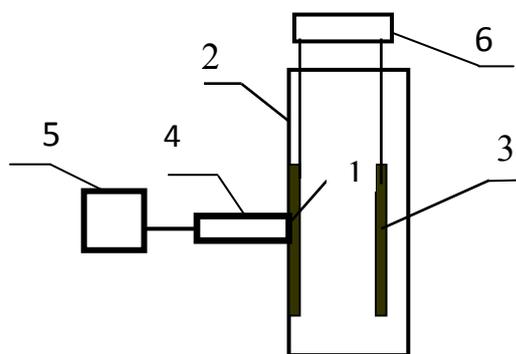


Рис. 1 Схема измерения коэффициента диффузии водорода: 1 - металлическая мембрана, 2 - вихретоковый датчик, 3 - платиновый анод, 4 - измеритель напряжения, 5 - источник постоянного тока, 6 - вихретоковый датчик

Рис. 2. Зависимость напряжения в относительных единицах на вихретоковом датчике от времени электролитической ячейки, насыщения мембраны водородом: цифрами 1 и 2 – вихретоковый датчик, 5 – измеритель напряжения, 6 – источник постоянного тока

Изменение электропроводности металла, насыщаемого водородом или любыми газами [1], приводит к изменению напряжения на вихретоковом датчике магнитного спектрометра. Величина электропроводности зависит от количества атомов водорода, приходящихся на каждый атом титана, от направления распространения токов по образцу-мембране.

Это вызвано появлением дефектов в ходе наводороживания. При диффузии через образец-мембрану появление водорода в его приповерхностном слое будет зафиксировано датчиком, если частота подобрана так, чтобы глубина проникновения вихревого тока в металл соответствовала толщине мембраны. Накопление водорода в мембране в процессе диффузии изменяет сопротивление мембраны. Таким образом, можно зафиксировать время изменения напряжения на вихретоковом датчике магнитного спектрометра связанное с появлением водорода в результате диффузии через мембрану. С этой целью вихретоковый датчик магнитного спектрометра устанавливают на поверхность металлической мембраны, которая является катодом, расположенным совместно с анодом в электролитической ячейке. Измеряют толщину мембраны и по формуле (1) рассчитывают частоту вихретокового датчика и устанавливают ее значение на датчике. Включают датчик и, поворачивая его вдоль вертикальной оси, находят максимальное значение напряжения до насыщения водородом, после чего подают напряжение на ячейку и фиксируют время включения. Как только водород достигает поверхностного слоя с противоположной от ячейки стороны мембраны, прекращается изменение показаний вихретокового датчика. Фиксируют время t , при котором показания вихретокового датчика магнитного спектрометра, достигают максимума (рис.2) и рассчитывают D .

Выводы. Таким образом, данный метод в полной мере учитывает процессы наводороживания металла, которые сопровождают процесс диффузии. А именно наличие ярко выраженной неоднородности расположения гидридов в титане, образование зерен, их формы, расположения по площади и глубине наводороженного металла. В наводороженном титане образуются гидриды титана TiH_n с различным количеством атомов водорода, что приводит к изменению коэффициентов диффузии вследствие образования гидридов TiH_n .

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Взаимодействие водорода с металлами / Под. ред. Захарова А.П. М.: Наука, 1987.
2. Ларионов В.В., Лисичко Е.В., Лидер А.М. Исследование модификации свойств наводороженных металлов вихретоковым методом // Вестник Челябинского государственного педагогического университета. – 2012. – № 6. – С. 268–276.
3. Тюрин Ю. И., Ларионов В. В., Никитенков Н. Н. // ПТЭ. 2016. № 5. С. 147. Yu. I. Tyurin, V. V. Larionov and N. N. Nikitenkov. Instruments and Experimental Techniques, 2016, Vol. 59, No. 5, pp. 772. DOI: 10.7868/S0032816216040273
4. Lider, A.M., Larionov, V.V., Syrtanov, M.S. Hydrogen concentration measurements at titanium layers by means of thermo-EMF 2016 Key Engineering Materials 683, pp. 199-202.
5. Lider, A., Larionov, V., Kroening, M., Kudiiarov, V. Thermo-Electromotive Force and Electrical Resistivity of Hydrogenated VT1-0 Titanium Alloy 2016 IOP Conference Series: Materials 012004.

**ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ ВОДОРОДА НА УДЕЛЬНОЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ
СОПРОТИВЛЕНИЕ ЦИРКОНИЯ: РАСЧЕТЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ**

Тан Цичэн

Научный руководитель: Л.А. Святкин

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: cichen1@tpu.ru

**INFLUENCE OF HYDROGEN CONCENTRATION ON ELECTRICAL RESISTIVITY OF
ZIRCONIUM: CALCULATIONS FROM FIRST PRINCIPLES**

Tang Qicheng

Scientific Supervisor: L.A. Svyatkin

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: cichen1@tpu.ru

***Abstract.** We present a first-principles study of the electron-phonon coupling and temperature dependence of intrinsic electrical resistivity in zirconium-hydrogen system with various concentration of hydrogen. By means of density functional theory and density functional perturbation theory, the Eliashberg function $\alpha^2F(\omega)$, Eliashberg transport function $\alpha_{tr}^2F(\omega)$ and their strength electron-phonon coupling constant λ and transport constant λ_{tr} were calculated. By solving Boltzmann equation in the lowest-order variational approximation, we got the temperature dependence of intrinsic electrical resistivity. We show that the tetragonal lattice distortion of FCC lattice leads to the formation of ϵ zirconium hydride with a weaker electron-phonon interaction, which, in turn, leads to the decrease in the electrical resistivity.*

Введение. Цирконий и сплавы на его основе широко используются для изготовления оболочек топливных элементов ядерных реакторов. В процессе эксплуатации эти материалы подвергаются интенсивному воздействию водорода, приводящему к изменению их эксплуатационных свойств. Так в работе [1] впервые было экспериментально установлено, что электрическое сопротивление системы ZrH_x при концентрациях водорода $x = H/Zr > 1,5$ резко уменьшается с ростом величины x . Однако до настоящего момента так и не было дано объяснения наблюдаемого характера зависимости электрического сопротивления циркония от концентрации водорода в нем. Целью настоящей работы является изучение из первых принципов температурной зависимости электрического сопротивления циркония от концентрации водорода в его решетке.

Метод и детали расчета. Электрон-фононное рассеяние вносит основной вклад в электрическое сопротивление металлических систем при очень низкой температуре. Влияние электрон-фононного взаимодействия на свойства переноса описывается транспортной спектральной функцией $\alpha_{tr}^2F(\omega)$. В вариационном приближении решения уравнения Больцмана выражение для удельного электрического сопротивления имеет вид

$$\rho(T) = \frac{\pi \Omega k_B T}{N(\epsilon_F) \langle v^2 \rangle} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} \frac{x^2}{\sinh^2 x} \alpha_{tr}^2 F(\omega), \quad (1)$$

где Ω – объем ячейки, $N(\varepsilon_F)$ – плотность состояния электронов каждого атома и каждого спина на уровне Ферми, $\langle v^2 \rangle$ – среднее значение скорости электронов, $x = \hbar\omega/(2k_B T)$, ω – частота фонона, k_B – постоянная Больцмана и T – температура. Более подробную информацию о теоретических методах можно найти в работе Саврасова [2].

В настоящей работе, все расчеты проводились в рамках теории функционала электронной плотности и теории возмущения электронной плотности методом оптимизированного сохраняющего норму псевдопотенциала Вандербилта [3] с обменно-корреляционным потенциалом GGA – PBE [4], реализованным в пакете программа ABINIT [5]. Энергия обрезания при разложении по базису плоских волн составляла 30 Хартри. В работе были исследованы системы $ZrH_{0,5}$, ZrH , $ZrH_{1,25}$, $ZrH_{1,5}$, $ZrH_{1,75}$, ZrH_2 и чистый цирконий. Системы ZrH , $ZrH_{1,25}$, $ZrH_{1,5}$, $ZrH_{1,75}$ и ZrH_2 имеют ГЦК структуру, $ZrH_{0,5}$ и чистый цирконий имеют ГПУ структуру. В каждой системе, водород размещался в тетраэдрических междоузлиях. Для релаксации систем использовались расчетные ячейки, состоящие из 4 атомов циркония. Для описания электронной структуры в Zr и системе Zr_2H использовался набор k-точек $13 \times 13 \times 4$, в остальных системах – $14 \times 14 \times 14$. Для расчетов линейного отклика рассматривались системы Zr_2H , Zr_2H_2 , Zr_4H_5 , Zr_2H_3 , Zr_4H_7 , Zr_2H_4 и Zr_2 . Набор k-точек в этом случае составлял $14 \times 14 \times 10$ для Zr и системы Zr_2H и $14 \times 14 \times 14$ для остальных систем. Набор q-точек необходимый для описания фононной структуры составлял $7 \times 7 \times 5$ в Zr и системе Zr_2H и $7 \times 7 \times 7$ в остальных системах.

Результаты и выводы. На рис. 1 представлены экспериментальные и рассчитанные нами температурные зависимости удельного электрического сопротивления $\rho(T)$ для чистого циркония и систем ZrH_x с различными концентрациями водорода x . Рассчитанные нами зависимость $\rho(T)$ для чистого циркония и зависимость $\rho(x)$ при 300 К хорошо согласуются с экспериментальными данными. Из рис. 1б видно, что при низкой концентрации водорода ($0 \leq x < 1$), сопротивление почти не изменяется с ростом концентрации водорода. При высокой концентрации водорода ($1 \leq x \leq 2$) с ростом концентрации водорода x сопротивление сначала сильно увеличивается, а после значения $x = 1,5$ наблюдается резкое уменьшение сопротивления с ростом концентрации водорода x . Согласно нашим расчетам, сопротивление системы ZrH_2 при температуре 300 К (27,52 мкОм·см) меньше, чем у чистого циркония (43,95 мкОм·см), что хорошо согласуется с результатами эксперимента [6] (26,7 мкОм·см для системы $ZrH_{1,96}$ и 42,6 мкОм·см для чистого Zr).

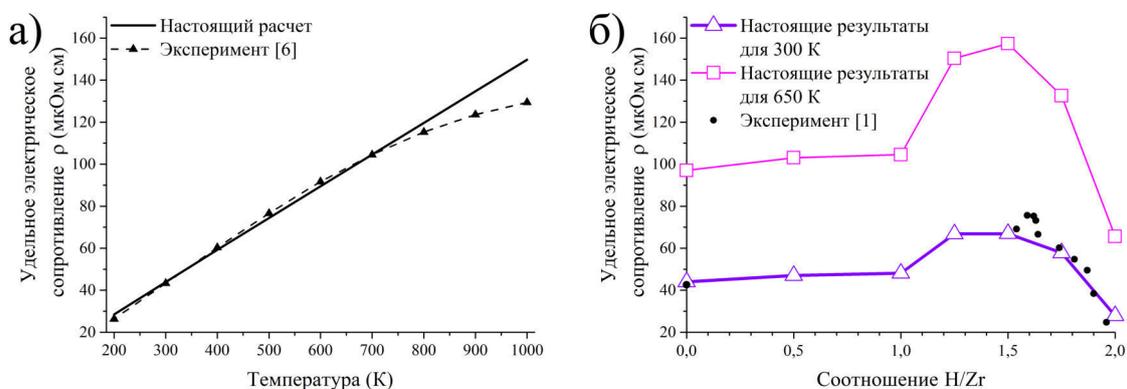


Рис. 1. Температурная зависимость $\rho(T)$ для чистого циркония (а) и концентрационная зависимость $\rho(x)$ для систем ZrH_x при 300 К и 650 К (б)

В настоящей работе показано, что понижение электрического сопротивления циркония с ростом концентрации водорода связано с тетрагональным искажением ГЦК решетки. Тетрагональные искажения решетки приводят к формированию ϵ -гидрида циркония с более слабым электрон-фононным взаимодействием, что, в свою очередь, приводит к уменьшению электрического сопротивления системы ZrH_x . Сравнение параметров электрон-фононного взаимодействия в δ - и ϵ -фазе ZrH_2 представлено на рис. 2.

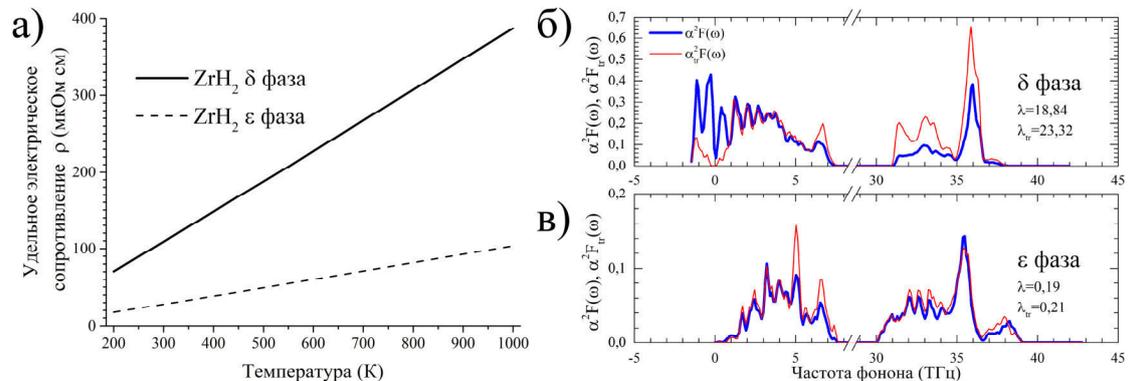


Рис. 2. Зависимость $\rho(T)$ для δ - и ϵ -фазы ZrH_2 (а), а также функции $\alpha^2 F(\omega)$ и $\alpha_v^2 F(\omega)$, рассчитанные нами для δ -фазы (б) и ϵ -фаз (в) ZrH_2

Как показано на рис. 2а, значения зависимости $\rho(T)$ и ее наклон у δ -фазы ZrH_2 больше, чем у ϵ -фазы при температурах выше 200 К. Это объясняется более сильным электрон-фононным взаимодействием в δ -фазе ZrH_2 . Так константа электрон-фононного взаимодействия λ и константа переноса λ_v в δ -фазе составляют 18,84 и 23,32, что значительно превышает соответствующие значения λ и λ_v в ϵ -фазе (0,19 и 0,21, соответственно). Также из рисунка 2б видно, что в δ -фазе частота фононов имеет отрицательные значения, что свидетельствует о более сильном электрон-фононном взаимодействии. После тетрагонального искажения, отрицательные частоты фононов исчезают (рис 2в), т.е. структура системы становится более стабильной, и электрон-фононное взаимодействие ослабляется. Также необходимо отметить, что высота пика, наблюдаемого в спектрах $\alpha^2 F(\omega)$ и $\alpha_v^2 F(\omega)$ при 35,5 ТГц и характеризующего колебания атомов водорода, в случае δ -фазы в 2,3-4,3 раза выше, чем в случае ϵ -фазы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bickel P.W., Berlincourt T.G. Electrical Properties of Hydrides and Deuterides of Zirconium // Phys. Rev. B – 1970. – Vol. 2. – № 12. – P. 4807-4813.
2. Savrasov S.Y., Savrasov D.Y. Electron-phonon interactions and related physical properties of metals from linear-response theory // Phys. Rev. B – 1996. – Vol. 54. – № 23. – P. 16487-16501.
3. Hamann D.R. Optimized norm-conserving Vanderbilt pseudopotentials // Phys. Rev. B – 2013. – Vol. 88. – № 8. – P. 085117(1-10).
4. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple // Phys. Rev. Lett. – 1996. – Vol. 77. – № 18. – P. 3865-3868.
5. ABINIT – abinit [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.abinit.org>.
6. Desai P.D. Electrical Resistivity of Vanadium and Zirconium / P. D. Desai, H. M. James, C. Y. Ho // J. Phys. Chem. Ref. Data – 1984. – Vol. 13. – № 4. – P. 1097-1130.

**МОДЕЛИРОВАНИЕ РАССЕЙНИЯ СВЕТА НА АТМОСФЕРНЫХ ЛЕДЯНЫХ КРИСТАЛЛАХ
СЛОЖНОЙ ФОРМЫ**

Д.Н. Тимофеев, А.В. Коношонкин

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. А.Г. Боровой

Институт оптики атмосферы имени В.Е. Зуева СО РАН,

Россия, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1, 634055

E-mail: tdn@iao.ru

**SIMULATION OF LIGHT SCATTERING ON ATMOSPHERIC ICE CRYSTALS WITH IRREGULAR
SHAPE**

D.N. Timofeev, A.V. Konoshonkin

Scientific Supervisor: Prof., Dr. A.G. Borovoi

V.E. Zuev Institute of Atmospheric Optics, RAS,

Russia, Tomsk, Academician Zuev sq., 1, 634055,

E-mail: tdn@iao.ru

***Abstract.** In the present paper the algorithm of light scattering simulation for irregular ice crystals that are typical for cirrus clouds is presented. It is based on the beam-splitting algorithm that was developed in IAO SB RAS. The algorithm transforms incident light field into scattered field. The previous algorithm is applicable for regular crystals such as hexagonal columns and plates but the new one treats hollow-columns, bullet-rosettes, aggregates etc. For implementation of the developed algorithm the program that calculates light scattering matrix for predefined crystals was created. The program works within the geometrical and physical optics approximations. The results of test calculations were compared with calculations of the program that implemented the well-known ray-tracing algorithm and show sufficient agreement.*

Введение. Атмосферные ледяные кристаллы, прежде всего, характерны для перистых облаков. Облака покрывают от 65 до 70% поверхности Земли и примерно 30% этих облаков являются перистыми. Перистые облака состоят из ледяных кристаллов различных форм и размеров (рис. 1). Они существенно влияют на процесс переноса солнечной энергии и, как следствие на формирование климата нашей планеты [1]. Получаемые в ходе изучения этого процесса сведения используются для улучшения качества прогноза погоды, объяснения явлений происходящих в атмосфере, а также для исследования загрязнений атмосферы. В связи с этим, актуальной является задача рассеяния света на частицах перистых облаков. Для решения прямой задачи рассеяния применяется метод компьютерного моделирования. Одним из алгоритмов, моделирующих процесс рассеяния света, является алгоритм трассировки пучков [2], получающий характеристики рассеянного света в приближении геометрической и физической оптик. Долгое время проводились расчёты кристаллов только простой формы, однако некоторые получаемые характеристики плохо сходились с данными лазерного зондирования. В связи с этим появилась необходимость усложнять форму кристаллов, что потребовало переработку существующего алгоритма. В данной работе представлена программа для расчёта матрицы рассеяния для атмосферных ледяных кристаллов сложной формы. За основу был взят алгоритм трассировки пучков,

работающий с простыми частицами. В качестве тестовой модели частицы был выбран гексагональный столбик с пирамидальными углублениями в основаниях. Сравнение результатов расчётов разработанной программы с результатами алгоритма лучевой трассировки на частицах сложной формы показали хорошее согласие.

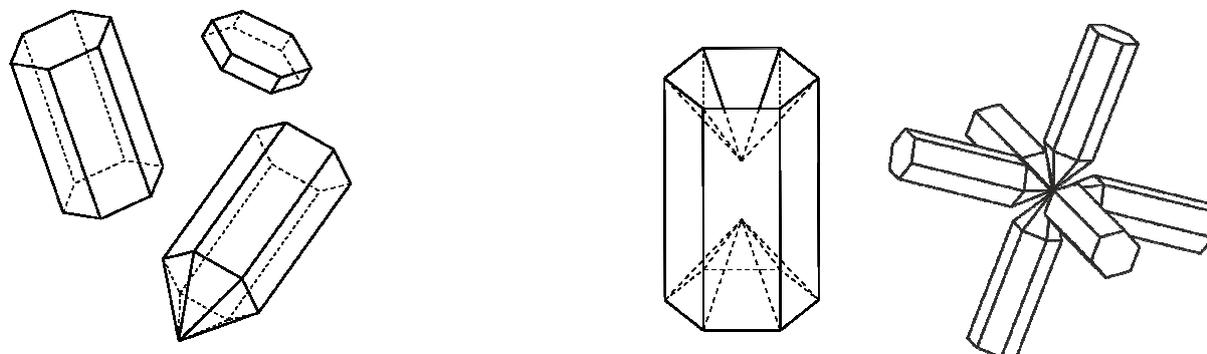


Рис. 1. Примеры простых (слева) и сложных (справа) кристаллов

Материалы и методы исследования. Разработанный алгоритм рассчитан на работу с кристаллами сложной формы. Основное отличие сложных кристаллов от простых заключается в наличии вогнутостей в форме кристалла. Эта особенность приводит к появлению особых случаев при трассировке пучков света. Один из них – образование пучков света невыпуклой формы. Образование таких пучков крайне нежелательно, т.к. их корректное пересечение с гранями частицы требует усложнения алгоритма и, как следствие, время трассировки значительно возрастает. У частиц простой формы исключено образование невыпуклых пучков. Однако наличие вогнутостей в частице может способствовать их образованию. На рис. 2 изображена частица с вогнутостью на месте верхнего основания и пучок света, направленный от нас. В данном случае одна часть пучка попадает в пространство внутри вогнутости, а вторая падает на поверхность частицы, принимая невыпуклую форму.

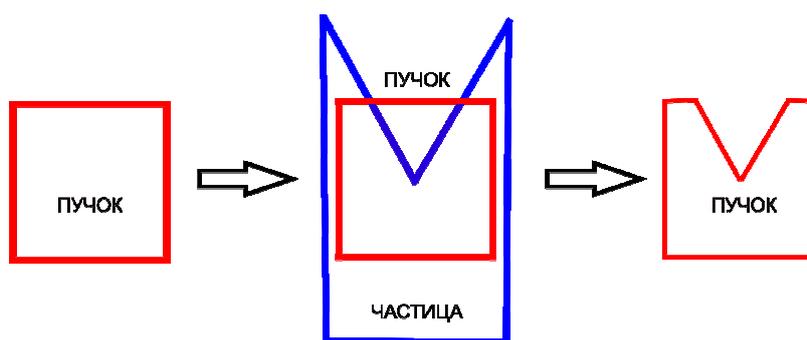


Рис. 2. Образование невыпуклого пучка света

Для предотвращения образования вышеописанных типов пучков в алгоритме МТП предусмотрено деление пучка света на выпуклые части во время его пересечения с гранью частицы. Для реализации пересечения использовался алгоритм Сазерленда-Ходсмана [3].

Результаты. Разработана компьютерная программа, реализующая данный алгоритм. Рассчитаны матрицы рассеяния света для тестового кристалла в приближении геометрической и физической оптик. На рис. 3 приведена зависимость элемента матрицы M_{11} от угла рассеяния (в диапазоне от 0 до 180°) и угла вогнутости в основаниях кристалла (от 0 до 36°). Расчёт проводился для кристалла высотой 100 мкм, диаметром 69,6 мкм, показателем преломления 1,31 для случая хаотической ориентации в пространстве в приближении геометрической оптики.

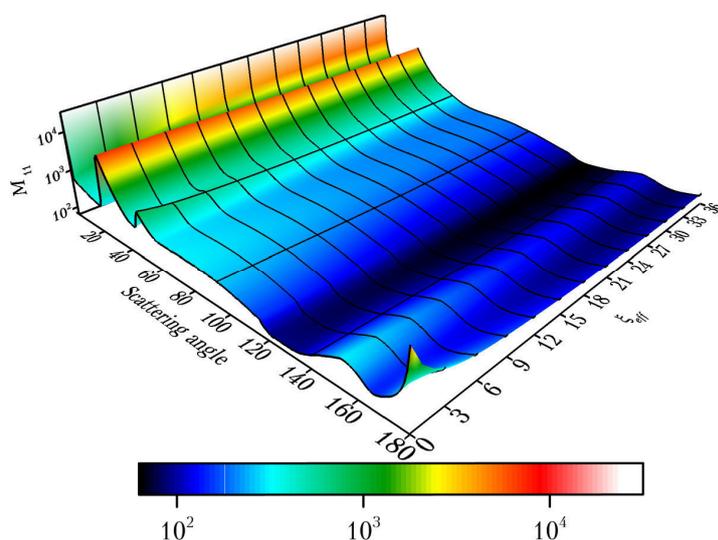


Рис. 3. Индикатриса рассеяния для гексагонального столбика при различной глубине вогнутостей

Заключение. Разработан алгоритм для моделирования процесса рассеяния света для атмосферных ледяных кристаллов сложной формы. Создана программа для расчёта матрицы рассеяния света для заданного кристалла. Результаты программы сравнивались с хорошо известным аналогом в приближении геометрической оптики. Алгоритм применим как для простых, так и сложных кристаллов в приближении геометрической и физической оптик.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ (16-35-60089, 18-05-00568, 18-55-53046) и грантов Президента РФ (МК-2495.2017.5 и НШ-8199.2016.5).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Liou, K.-N. An Introduction to Atmospheric Radiation. – Academic Press, 2002. – 583 с.
2. Konoshonkin A.V., Kustova N.V., Borovoi A.G. Beam-splitting code for light scattering by ice crystal particles within geometric-optics approximation // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. – 2015. – Т. 164. – С. 175–183.
3. Sutherland-Hodgman algorithm, [Электронный ресурс]. URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Sutherland%E2%80%93Hodgman_algorithm/ (дата обращения 30 января 2018).

**ПРОЧНОСТНЫЕ СВОЙСТВА КЕРАМИЧЕСКОГО КОМПОЗИТА $ZrO_2 - MgO$ ПРИ
ТРЕХТОЧЕЧНОМ ИЗГИБЕ**

Д.А.Ткачев, А.С. Буяков

Научный руководитель: д.ф.-м.н., профессор С.Н. Кульков

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

Email: d.tkachev11@gmail.com

STRENGTH PROPERTIES OF POROUS COMPOSITE $ZrO_2 - MgO$ AT THREE-POINT BENDING

D.A.Tkachev, A.S.Buyakov

Scientific Supervisor: Prof., Dr. S.N.Kulkov

National Research Tomsk Polytechnic University

Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

Email: d.tkachev11@gmail.com

***Abstract.** The following research represents experimental data on strength characteristics of porous $ZrO_2(MgO) - MgO$ composite. The dependence of obtained values on the concentration of MgO and sintering time was investigated. Bending strength and Young's modulus increase with increasing concentration of magnesium oxide. After reaching the concentration of 20% of MgO the mechanical parameters decreases, what is related to phase transformations in the material.*

Рассматриваемый в работе композит на основе диоксида циркония (ZrO_2) и оксида магния (MgO) известен как материал, обладающий высокой коррозионной стойкостью и биологической совместимостью, что позволяет использовать его в качестве остеозамещающего [1]. Важную роль, помимо биологической и химической совместимости, играют прочностные характеристики материала, которые должны соответствовать характеристикам костной ткани. Один из видов нагружения, которому будет подвергаться материал в процессе эксплуатации – изгиб. Поэтому, в процессе разработки материала для остеозамещения необходимо определить его способности выдерживать изгибающие напряжения.

Целью настоящей работы является оценка влияния концентрации оксида магния (MgO) на прочностные характеристики пористого композита $ZrO_2(MgO) - MgO$ при трехточечном изгибе. Образцы имели форму балок со средней длиной 34 мм., и сечением со средней высотой 3 мм., шириной 5,5 мм. Концентрация оксида магния составлял 0, 25, 50, 75 и 100 мас. %. Для исследуемых образцов определены предел прочности при трехточечном изгибе и модуль упругости.

Образцы были изготовлены методом одноосного холодного прессования с помощью гидравлического прессы в закрытой металлической пресс-форме при давлении 100 МПа, без добавления связующего. Исходными материалами являлись керамические порошки: ZrO_2 , стабилизированный 3 мол % MgO , MgO и сверхвысокомолекулярный полиэтилен (СВМПЭ) в качестве порообразующей добавки, в объеме 50 % от каждого состава.

Спекание проводилось в воздушной атмосфере при температуре 1600°C с различной длительностью высокотемпературной выдержки. Для удаления СВМПЭ перед спеканием был проведен отжиг с изотермической выдержкой в течении часа при температуре 300°C.

Механические испытания по определению прочности при трехточечном изгибе проводились на испытательной машине Instron E1000, скорость нагружения испытываемых образцов составила 0,3 мм*мин⁻¹.

Графики изменения предела прочности и модуля Юнга при варьировании концентрации MgO в составе композита и различном времени выдержки представлены на рисунке 1 а, б.

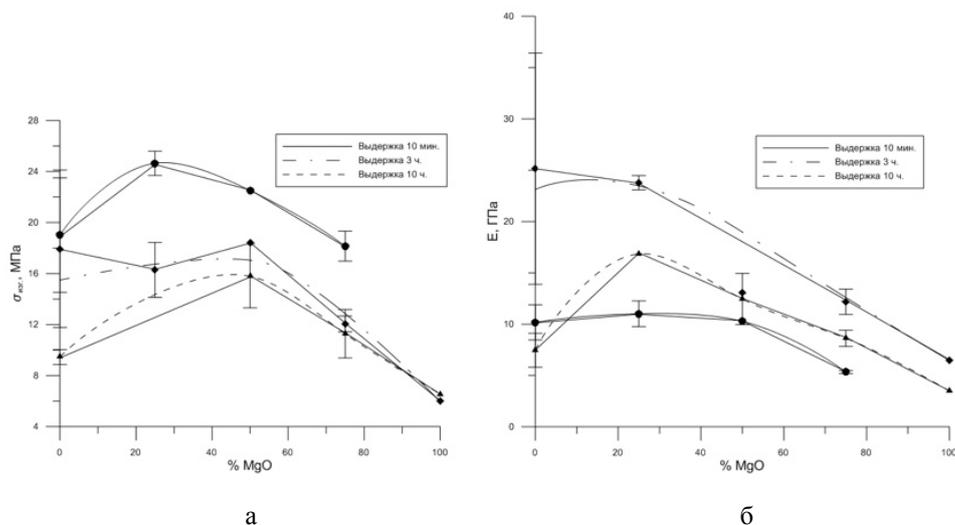


Рис. 1 – Зависимость предела прочности (а) и модуля Юнга (б) композита $ZrO_2(MgO) - MgO$ от концентрации MgO с варьируемым временем выдержки

Зависимость имеет нелинейный характер и объясняется фазовыми переходами в системе $ZrO_2 - MgO$ (рис. 2): стабилизацией кубической фазы ZrO_2 с увеличением времени высокотемпературной выдержки, а так же достижением предела растворимости MgO с увеличением концентрации [2].

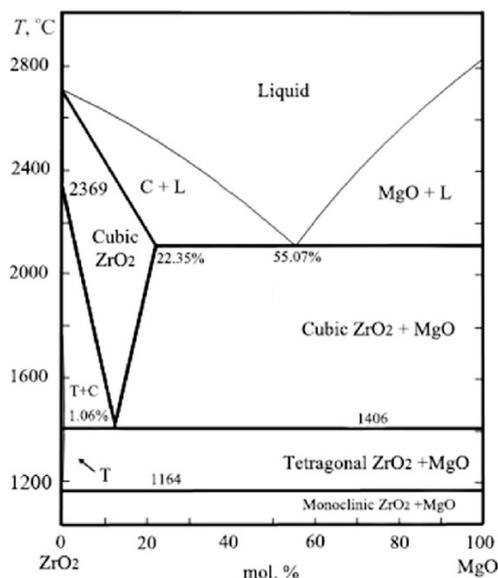


Рис. 2 – диаграмма состояний системы $ZrO_2 - MgO$

При концентрациях MgO до 10 % при температуре 1600°C присутствует тетрагональная фаза ZrO₂, которой свойственны локально протекающие мартенситные превращения t→m, из тетрагональной фазы в моноклинную, способствующие увеличению объема зоны деформации, и в следствие чего, понижению напряжений в острие трещины [3, 4]. Затем, после достижения концентрации 20% MgO, достигнув предела растворимости в кубической решетке ZrO₂, выделяется в виде отдельной фазы [5]. Присутствие только механической смеси кубической фазы ZrO₂ и MgO приводит к уменьшению прочности и модуля упругости материала при изгибе, так как значение прочности при изгибе MgO меньше, чем ZrO₂, о чем свидетельствуют полученные результаты, отображенные на рисунке 1-а.

Согласно полученным результатам, предел прочности исследуемых образцов керамики ZrO₂(MgO) – MgO возрастает с увеличением концентрации MgO до максимального значения 24 МПа, после достижения предела растворимости, который соответствует 20% концентрации MgO, снижается, минимальное значение составляет 6 МПа, модуль упругости возрастает до 36 ГПа до достижения концентрации оксида магния равной 20%, и достигает минимального значения 5 ГПа при последующем увеличении концентрации MgO.

Таким образом, экспериментально полученные результаты механических характеристик исследуемого композита на основе ZrO₂ можно соотнести с приводимыми в литературе значениями для костной ткани. Для губчатой костной ткани значения предела прочности приводятся в пределах 7-22 МПа [6], для компактной костной ткани модуль упругости варьируется в пределах 4-22 ГПа [7].

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках Соглашения № 14.584.21.0026 (RFMEFI58417X0026).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Buyakov A., et al. Porous Ceramic Composite ZrO₂(MgO)-MgO for Osteoimplantology, Abstracts of the International Conference on Physics of Cancer: Interdisciplinary Problems and Clinical Applications, Tomsk, March 22-25, 2016.
2. Viechnicki D., Stubican V. S. Phase Studies Within the System ZrO₂-MgO //Nature. – 1965. – Т. 206. – №. 4990. – С. 1251.
3. Головин Ю. И. и др. Синтез и характеристика физико-механических свойств стабилизированной циркониевой керамики из природного бадделеита //Вестник Тамбовского университета. Серия: Естественные и технические науки. – 2012. – Т. 17. – №. 3.
4. Buyakova S. P. et al. Structure and properties of ZrO₂-MgO powders //IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – IOP Publishing, 2016. – Т. 123. – №. 1. – С. 012040.
5. Grigor'ev, M. V., Savchenko, N. L., Buyakova, S. P., & Kul'kov, S. N. (2017). Inelastic behavior of ceramics with hierarchical pore structure under compression. Technical Physics Letters, 43(8), 723-726.
6. Olson S.A. Designing a biomechanics investigation: choosing the right model // J Orthop Trauma. – 2012 Dec. – № 26(12). – P. 672–7.
7. Currey J. D. Mechanical properties of vertebrate hard tissues //Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part H: Journal of Engineering in Medicine. – 1998. – Т. 212. – №. 6. – С. 399-411.

**ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ПРОЦЕССА МИКРОДУГОВОГО ОКСИДИРОВАНИЯ И СОСТАВА
ЭЛЕКТРОЛИТА НА ФОРМИРОВАНИЕ И СВОЙСТВА СЕРЕБРОСОДЕРЖАЩИХ
БИОПОКРЫТИЙ**

А.В. Угодчикова

Научный руководитель: доцент, д.т.н. М.Б. Седелникова

Институт физики прочности и материаловедения, СО РАН

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: ugodch99@gmail.com

**THE IMPACT OF MICROARC OXIDATION PROCESS PARAMETES AND ELECTROLYTE
COMPOSITION ON THE FORMATION AND PROPERTIES OF SILVER-CONTAINING
BIOCOATINGS**

A.V. Ugodchikova

Scientific Supervisor: Assoc. Prof., Dr. M.B. Sedelnikova

Institute of Strength Physics and Materials Science, SB RAS

National Research Tomsk Polytechnic University, Lenin str., 30, 634050

E-mail: ugodch99@gmail.com

***Abstract.** Research of microarc calcium phosphate biocoatings on the pure titanium (Ti) and Ti–40 мас.% Nb (Ti – 40Nb) alloy were presented. The dependences of the coating properties and on the microarc oxidation parameters and electrolyte composition were found. A variation of the process parameters and electrolyte composition allowed producing biocoatings with crystal and porous structure.*

Введение. Разработка материалов, биосовместимых с живой тканью организма на сегодняшний день является актуальным направлением [1]. Благодаря высокой биосовместимости и коррозионной стойкости титан и его сплавы на протяжении многих лет успешно применяются в качестве материалов для медицинских металлических имплантатов [2,3]. Метод микродугового оксидирования (МДО) позволяет формировать биоактивные кальцийфосфатные покрытия [4,5] с толщиной до сотен микрометров и пористой структурой на металлических имплантационных материалах [6]. Бактериальная инфекция, возникающая после введения имплантата в среду живого организма, может приводить к отторжению имплантата и повторным операциям. Частицы или ионы серебра демонстрируют высокую антимикробную активность, что позволяет использовать их в составе покрытий для повышения бактерицидного действия имплантационных материалов [7]. Целью работы является получения кальцийфосфатных серебросодержащих биопокрытий методом МДО, исследование влияния параметров процесса и состава электролита на формирование морфологии поверхности покрытий и их фазового состава.

Материалы и методы исследования. Для проведения экспериментов были подготовлены образцы – металлические пластинки (10×10×1 мм) из титана (BT1-0) и сплава Ti–40мас.%Nb. Были разработаны два состава электролита, в состав электролита № 1 входили следующие компоненты: Na₂HPO₄, β-Ca₃(PO₄)₂, NaOH. Для получения Ag-содержащих КФ покрытий в электролит №2 в кроме

перечисленных компонентов, добавляли нитрат серебра. Нанесение покрытий осуществлялось на установке «MicroArc 3.0 System» (ИФПМ СО РАН) [1]. Основные параметры процесса МДО варьировали в следующих пределах: напряжение 350 – 450 В, время нанесения покрытия 5 – 10 мин. Фазовый состав исследовали с помощью дифрактометра ДРОН-7 (ЦКП ИФПМ СО РАН «Нанотех» г. Томск), шероховатость поверхности покрытий исследовали по параметру Ra (ГОСТ 2789-73) на профилометре-296 (ИФПМ СО РАН, г. Томск). Исследования морфологии поверхности покрытий и элементного состава проводили методом РЭМ (SEM 515 Philips с приставкой для энергодисперсионного анализа, ТРЦКП ТГУ, г. Томск).

Описание результатов и обсуждение. Рентгенофазовый анализ (рис.1) показал наличие в покрытиях следующих кристаллических фаз: α - $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$, β - $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ – альфа-бета-трикальцийфосфаты, TiO_2 - анатаз, $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ – гидроксапатит, Nb – ниобий.



Рис. 1. Рентгенограммы покрытий на титане (а) и титан-ниобиевом сплаве (б), α - $\alpha\text{-Ca}_3(\text{PO}_4)_2$; β - $\beta\text{-Ca}_3(\text{PO}_4)_2$; H - $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$; N – Nb, A - TiO_2 (анатаз)

При увеличении напряжения процесса МДО от 350 до 450 В на рентгенограммах покрытий на титане наблюдается уменьшение количества пиков, соответствующих фазам материала подложки, и увеличение рефлексов, соответствующих фазам трикальцийфосфата (бета и альфа). Анализ рентгенограмм покрытий на титан-ниобиевом сплаве показывает, что при повышении напряжения процесса наблюдается формирование более аморфной структуры, чем на титане.

На рис. 2 (а,б) представлены РЭМ-изображения КФ-покрытий на титане (BT1-0), на рис.2 (в,г) – на сплаве Ti – 40%мас.Nb при напряжении процесса 350 В, времени нанесения 10 минут.

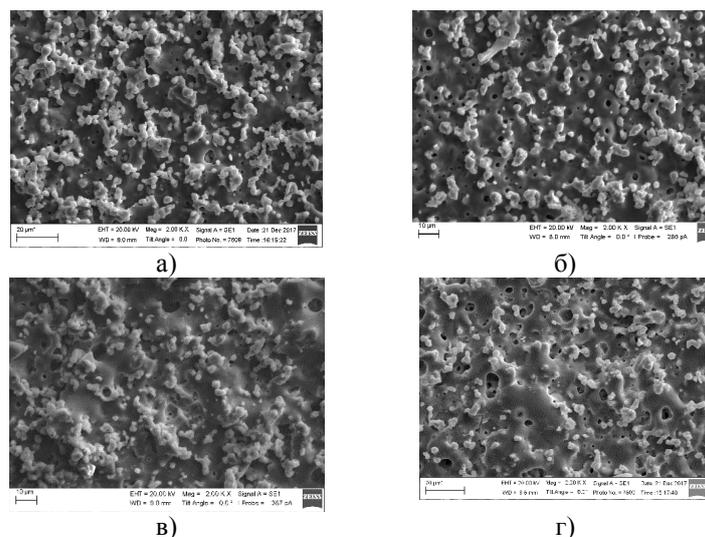


Рис. 2. РЭМ – изображения КФ-покрытий, полученных в электролите №2 – на титане (BT1-0) (а.); на сплаве Ti – 40%мас.Nb (в.); в электролите №1 – на титане (б), на сплаве Ti – 40%мас.Nb (г)

Покрyтия имеют пористую структуру. На изображениях (рис.2) отчетливо видны частицы изометричной формы, соответствующие соединениям трикальцийфосфата, перенесенным из электролита в покрытие в процессе МДО. В покрытиях, нанесенных в серебряносодержащем электролите, наблюдается большее содержание частиц трикальцийфосфата, чем в электролите без содержания серебра.

Выводы. Методом МДО на поверхности титана (BT1-0) и сплава Ti–40мас.%Nb получены пористые кальцийфосфатные покрытия с кристаллическими фазами α -Ca₃(PO₄)₂; β -Ca₃(PO₄)₂; Ca₁₀(PO₄)₆(OH)₂. При увеличении напряжения процесса МДО от 350 до 450 В в покрытиях на титане наблюдается уменьшение количества пиков, соответствующих фазам материала подложки, и увеличение фаз трикальцийфосфата, а в покрытиях на титан-ниобиевом сплаве формируется более аморфная структура, чем на титане. Введение соединений серебра в электролит позволяет повысить интенсивность процесса МДО, и увеличить концентрацию частиц ТКФ в покрытиях.

Работа выполнена в Институте физики прочности и материаловедения СО РАН, при финансовой поддержке РФФИ, проект № 15-03-07659.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. E. V. Legostaeva, Yu. P. Sharkeev, M. Epple, O. Prymak. (2014). Structure and properties of microarc calcium phosphate coatings on the surface of titanium and zirconium alloys [Electronic version]. Russian Physics Journal, V. 56 (10), pp. 1130-1136.
2. H.J. Rack, J.I. Qazi. (2006). Titanium alloys for biomedical applications [Electronic version]. Material Science and Engineering, no. C26, pp. 1269 - 1277
3. Marc Long, H.J. Rack. (1998) Titanium alloys in total joint replacement - a materials science perspective [Electronic version]. Biomaterials, no.19, pp. 1621 - 1639
4. Kuo-Tien Chua. (2013). Research of phase transformation induced biodegradable properties on hydroxyapatite and tricalcium phosphate based bioceramic [Electronic version]. Ceramics International, no. 39, pp. 1455–1462
5. S. V. Dorozhkin, M. Epple. (2002). Biological and Medical Significance of Calcium Phosphates [Electronic version]. Angew. Chem. Int. Ed.,no. 41, pp. 3130 - 3136
6. Y.K. Pan, C.Z. Chen. (2013). Preparation and bioactivity of microarc oxidized calcium phosphate coatings [Electronic version]. Materials Chemistry and Physics, no. 141, pp. 842 - 849
7. Gary A. Fielding, M.Roy. (2012). Antibacterial and biological characteristics of silver containing and strontium doped plasma sprayed hydroxyapatite coatings [Electronic version]. Acta Biomaterialia, no. 8, pp. 3144 - 3152

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОНИЦАЕМОСТИ УГЛЕРОДНОГО НАНОПОЛОТНА

А.В. Уколов, М.А. Бубенчиков

Научный руководитель: Профессор, д. ф.-м. н. А. М. Бубенчиков

Томский государственный университет, Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050

E-mail: Ukolov33@gmail.com

RESEARCH OF PERMIABILITY CORBON NONOWIRES

A.V. Ukolov, M.A. Bubenchikov

Scientific Supervisor: Prof., Dr. A.M. Bubenchikov

Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050

E-mail: Ukolov33@gmail.com

***Abstract.** The design of nanowires with intersecting spherical particles was carried out, after which the constructions determining the cellular structure of the flat web were made. The mathematical model presented in this paper is a classical model of the dynamics of molecules in potential fields of spherical particles. By systematic calculations it was established that in the case of a web composed of diamond threads the relative permeability of the structure is the relative area of the free passage zone of the nanowires cell, found from the effective radius of the nanowires.*

For a fabric made of diamond nanowires with a diameter of 0.7 nm, it is shown that there is no accumulation of gas components in the potential wells of the structure. Thus, the ideal carbon structure under consideration is "pure". This allows us to hope that the filtration regime of the gas components will be kinetic rather than diffusion. In this case, the network of diamond threads can serve as the main separation layer of the nanoporous membrane. Systematic calculations show that the relative permeability of a component, is the proportion of the area of the permeability window in the total area of the cell web.

Нанонити являются конструктивным элементов во многих новых материалах. Производство нанонитей, равномерно ориентированных по любой произвольно выбранной оси кристалла, является важной, но нерешенной проблемой в материаловедении. В работе [1] представлено обобщенное решение этой проблемы. Авторами был предложен метод огибающего углового осаждения в сочетании с быстрым изменением направления осаждения между положениями симметрии кристалла. В работе [2] авторами был предложен экономически выгодный способ получения пористых нанонитей на основе кремния методом химического травления. Материал, сконструированный на основе таких нитей обеспечивает хорошую проницаемость как для ионов лития, так и для электронов.

Таким образом, как видно из приведенного краткого обзора, большинство работ посвящено синтезу нанонитей, а также получению материалов на их основе, обладающих заданными свойствами. Работ по математическому моделированию технологий с использованием нановолокнистых материалов крайне мало.

Поскольку селективные поры наносетчатых структур имеют размер 10^{-9} м, а средняя длина свободного пробега молекул газов при нормальных условиях порядка 10^{-7} м, то для описания взаимодействия молекул со структурой необходимо использовать модель разреженного газа либо метод

одиночной частицы, а статистику набирать множественными испытаниями движений молекул. В дальнейшем будем опираться на первый подход, решая задачу проникновения, как задачу множественных испытаний, а задачу физической сорбции как задачу накопления молекул в потенциальных ямах структуры.

Уравнения динамики перемещающейся молекулы запишем в стандартной форме в виде второго закона Ньютона, который в проекциях на оси декартовых координат имеет вид:

$$m \frac{du}{dt} = \sum_{j=1}^{N_p} X_j, \quad m \frac{dv}{dt} = \sum_{j=1}^{N_p} Y_j, \quad m \frac{dw}{dt} = \sum_{j=1}^{N_p} Z_j. \quad (1)$$

Здесь m – масса пробной молекулы, пропускаемой через фильтр, N_p – количество частиц, составляющих фрагмент структуры; X_j, Y_j, Z_j – проекции сил взаимодействия пробной молекулы и j -той наночастицы, которые определяются следующим образом:

$$X_j = a_j \frac{x - x_j^0}{\rho_j} m, \quad Y_j = a_j \frac{y - y_j^0}{\rho_j} m, \quad Z_j = a_j \frac{z - z_j^0}{\rho_j} m, \quad (2)$$

где a_j – величина ускорения, приобретаемого пробной молекулой под действием j -той наночастицы, x, y, z – координаты определяющие положение пробной молекулы, x_j^0, y_j^0, z_j^0 – координаты частиц образующих полотно.

Потенциал взаимодействия наночастица – молекула выбирается в форме, предложенной В.Я. Рудяком и С.Л. Краснолуцким [3]:

$$\Phi_9^3(\rho_j) = \Phi_9(\rho_j) - \Phi_3(\rho_j). \quad (3)$$

Здесь ρ_j – расстояние от центра наночастицы до центра пробной молекулы, ρ_p – радиус наночастицы (эта же величина будет собственным радиусом нанонити).

$$\Phi_9(\rho_j) = C_9 \left\{ \left[\frac{1}{(\rho_j - \rho_p)^9} - \frac{1}{(\rho_j + \rho_p)^9} \right] - \frac{9}{8\rho_j} \left[\frac{1}{(\rho_j - \rho_p)^8} - \frac{1}{(\rho_j + \rho_p)^8} \right] \right\}, \quad (4)$$

$$\Phi_3(\rho_j) = C_3 \left\{ \left[\frac{1}{(\rho_j - \rho_p)^3} - \frac{1}{(\rho_j + \rho_p)^3} \right] - \frac{3}{2\rho_j} \left[\frac{1}{(\rho_j - \rho_p)^2} - \frac{1}{(\rho_j + \rho_p)^2} \right] \right\}. \quad (5)$$

Значения констант взаимодействия ε и σ , входящих в LJ -потенциал, для некоторых пар одинаковых молекул приведены в таблице 1 [4,5].

Таблица 1

Параметры LJ -потенциала для различных молекул

Взаимодействующие молекулы	Относительная глубина потенциальной ямы	Радиус влияния LJ -потенциала
C – C (1)	$\varepsilon/k = 51,2$ К	$\sigma = 0,335$ нм
He – He (2)	$\varepsilon/k = 10,2$ К	$\sigma = 0,228$ нм
H ₂ – H ₂ (3)	$\varepsilon/k = 34$ К	$\sigma = 0,29$ нм
O ₂ – O ₂ (4)	$\varepsilon/k = 117$ К	$\sigma = 0,35$ нм
CH ₄ – CH ₄ (5)	$\varepsilon/k = 148$ К	$\sigma = 0,38$ нм
Примечание – k – постоянная Больцмана.		

Параметры парных взаимодействий для различных веществ ϵ_{12} и σ_{12} определяются по формулам среднего арифметического и среднего геометрического:

$$\sigma_{12} = \frac{\sigma_{11} + \sigma_{22}}{2}, \quad \epsilon_{12} = (\epsilon_{11} \cdot \epsilon_{22})^{1/2}. \quad (6)$$

Если дополнить уравнения (1) кинематическими соотношениями:

$$\frac{dx}{dt} = u, \quad \frac{dy}{dt} = v, \quad \frac{dz}{dt} = w, \quad (7)$$

то получим систему шести дифференциальных уравнений первого порядка для движения пробной молекулы через структуру полотна, составленного нанонитями. Эти уравнения с очевидными начальными условиями будем решать численно явными методами пошаговых вычислений.

Для полотна, выполненного из алмазных нанонитей диаметром 0,7 нм показано, что не происходит накопления газовых компонент в потенциальных ямах структуры. Таким образом, рассматриваемая идеальная углеродная структура является «чистой». Это позволяет надеяться, что режим фильтрации газовых компонент будет кинетическим, а не диффузионным. В этом случае сетка из алмазных нитей может выполнять функцию основного разделительного слоя нанопористой мембраны. Систематическими расчетами показано, что относительная проницаемость той или иной компоненты, есть доля площади окна проницаемости в общей площади ячейки полотна.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Tao Y., Degen C.L. Growth of magnetic nanowires along freely selectable crystal directions // Nature Communications, 2018, 9:339. DOI: 10.1038/s41467-017-02519-8
2. Lui L., Xiong J., Yang T., Qin Y., Yan C. Porous Si nanowires from Cheap Metallurgical Silicon Stabilized by a Surface Oxide Layer for Lithium Ion Batteries // WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2015, 25, 6701–6709. DOI: 10.1002/adfm.201503206
Фамилия И.О. Название статьи // Журнал. – 2012. – Т. 1. – № 11. – С. 71–77.
3. Rudyak V.Y. The calculation and measurements of nanoparticles diffusion coefficient in rarefied gases / V.Y. Rudyak, S.L. Krasnolutskiy // J. Aerosol Science. – 2003. – Vol. 34, suppl. 1. – P. 579–580. DOI: 10.1016/S0021-8502(03)00148-4 Пат. 2000000 РФ. МПК8 G01N 29/04. Способ определения ... / И.О. Фамилия. Заявлено 10.04.2007; Опубл. 10.02.2008, Бюл. № 4. – 6 с.
4. Глушко В.П. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания. Том 1. / В.П. Глушко // Москва. – 1971. – 263.
5. Справочник химика. Том 1. / под ред. Б.П. Никольского // М-Л. : Химия. – 1982. – 1072 с.

**АДСОРБЦИЯ ФТОРА И КОАДСОРБЦИЯ ФТОРА И КИСЛОРОДА НА
In-ОБОГАЩЕННОЙ ПОВЕРХНОСТИ InSb(111)**

А.А. Фукс, А.В. Бакулин

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. С.Е. Кулькова

Национальный исследовательский Томский государственный университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050

E-mail: artemfux@yandex.ru

**FLUORINE ADSORPTION AS WELL AS FLUORINE AND OXYGEN COADSORPTION
ON In-RICH InSb(111) SURFACE**

A.A. Fuchs, A.V. Bakulin

Scientific Supervisor: Prof., Dr. S.E. Kulkova

Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050

E-mail: artemfux@yandex.ru

Abstract. *The oxygen and fluorine adsorption and their coadsorption on the InSb(111)-(1×1) surface have been studied by the projector augmented-wave method within density functional theory. The indium top site was found to be the most energetically favorable for fluorine adsorption, whereas oxygen prefers to be bonded to the bridge site between two In atoms. It is shown that the oxygen-induced surface states are completely or partly removed from the band gap by fluorine coadsorption if it forms bonds with the indium atoms involved in an interaction with oxygen. An increase of fluorine concentration and its coadsorption bring about appreciable structural changes in the near-surface layers due to the penetration of both oxygen and fluorine atoms into the substrate.*

Введение. Полупроводниковые соединения элементов III и V групп широко используются для современных приложений в микроэлектронике вследствие высокой подвижности носителей заряда по сравнению с кремнием. В то же время создание границ раздела полупроводник – оксид с низкой плотностью интерфейсных состояний является ключевой проблемой для производства нового поколения приборов и устройств на основе структур металл–диэлектрик–полупроводник. В качестве диэлектрика очень часто используется собственный оксид, свойства которого могут быть улучшены путем модификации его состава. Известно, что выращивание на поверхности InAs(111)A тонкого (10-15 нм) фторсодержащего анодного оксидного слоя позволяет получить на границе раздела InAs – оксид плотность состояний $<5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2} \text{ эВ}^{-1}$ [1]. Аналогичный эффект фтора известен и на поверхности GaAs(001). Изучение влияния адсорбции и коадсорбции фтора на атомную и электронную структуру полярной поверхности (111) других полупроводников A^{III}B^V теоретическими методами не проводилось. В этой связи целью настоящей работы является изучение влияния адсорбции и коадсорбции кислорода и фтора на атомную и электронную структуру поверхности InSb(111).

Метод расчета. Расчёт атомной и электронной структур поверхности InSb(111) проводился методом проекционных присоединённых волн, реализованным программным комплексом VASP, с обобщенным градиентным приближением для обменно-корреляционного функционала. Поверхность InSb(111)-(1×1) моделировалась восьмислойными плёнками, разделёнными промежутками вакуума

~10 Å. Нижняя сторона пленки, оканчивающаяся атомами сурьмы, насыщалась атомами псевводорода H^* с дробным зарядом в 0.75 электрона. В расчётах оптимизировались положения атомов четырех верхних слоев, тогда как атомы двух слоев индия и сурьмы с противоположной стороны пленки фиксировались в объемных позициях. Интегрирование по зоне Бриллюэна проводилось с использованием сетки k -векторов $7 \times 7 \times 1$, полученной по схеме Монхорста–Пака. Электронная структура поверхности $InSb(111)-(1 \times 1)$ рассчитывалась с использованием гибридных функционалов HSE06, что позволило более корректно воспроизвести структуры поверхностных состояний в запрещенной щели.

Энергия связи кислорода (фтора) с подложкой рассчитывалась по следующей формуле:

$$E_b = -[E_{O(F)/InSb} - E_{InSb} - E_{O(F)}],$$

где E_{InSb} и $E_{O(F)/InSb}$ – полная энергия системы с адсорбированным атомом кислородом (фтором) и без него, $E_{O(F)}$ – энергия атома кислорода (фтора), рассчитанная в пустом боксе размером $12 \times 12 \times 12$ Å.

Результаты. Адсорбция атомов кислорода и фтора изучалась в высокосимметричных позициях на поверхности, представленных на рис. 1а. Показано, что наибольшая энергия связи фтора соответствует вершинной In-top позиции над атомом индия поверхностного слоя, тогда как кислород предпочитает адсорбироваться в мостиковой In-br позиции между двумя атомами индия (таблица 1). При этом в наиболее предпочтительных позициях энергия связи кислорода оказалась на ~0.8 эВ выше, чем фтора.

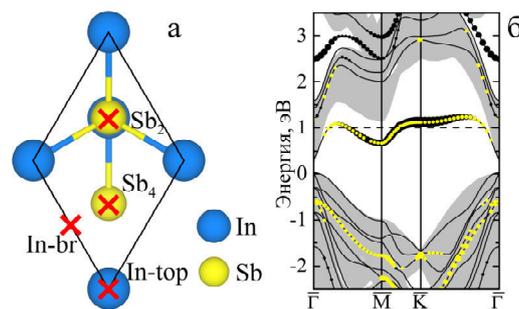


Рис. 1. Позиции адсорбции кислорода и фтора на поверхности $InSb(111)$ (а), электронный энергетический спектр чистой поверхности (б). Чёрными и жёлтыми шариками обозначены поверхностные состояния индия и сурьмы соответственно

Расчеты показали, что состояние, закрепляющее уровень Ферми на поверхности без адсорбатов (рис. 1б), удаляется из запрещенной щели при адсорбции фтора. Из рис. 2а видно, что данное состояние полностью опустошается и смещается в зону проводимости. При этом происходит частичное опустошение состояний атома сурьмы подповерхностного слоя посредством перетекания заряда от этого атома к поверхностному индию и от него к электроотрицательному атому.

Таблица 1

Энергии связи (E_b) атомов фтора и кислорода на поверхности $InSb(111)$

E_b , эВ	In(Ga)-br	In(Ga)-top	Sb ₂ (As ₂)	Sb ₄ (As ₄)
F/InSb	4,54	5,14	4,22	4,42
O/InSb	5,93	4,35	4,98	4,84

Адсорбция кислорода на (1×1) поверхности индуцирует появление дополнительных состояний в запрещенной зоне, структура которых зависит от его позиции на поверхности. В частности для наиболее

предпочтительной позиции в запрещенной щели появляются состояния, локализованные на атоме кислорода и на поверхностном и подповерхностном атомах индия и сурьмы (рис. 2б). При коадсорбции кислорода и фтора поверхностные состояния, индуцированные адсорбцией кислорода, полностью или частично удаляются фтором из запрещенной зоны, если он образует связи с атомами индия, вовлеченными во взаимодействие с кислородом. Как видно из рис. 2в, при адсорбции трех атомов фтора поверхностные состояния в щели практически отсутствуют, и имеется только незначительная плотность состояний на краю зоны Бриллюэна вблизи точки \bar{K} .

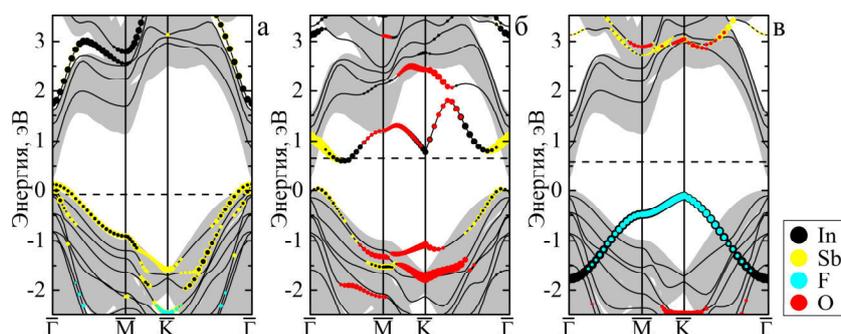


Рис. 2. Электронные энергетические спектры поверхности $\text{InSb}(111)$ с адсорбированными атомами фтора (а), кислорода (б), а также при их коадсорбции (в)

При увеличении концентрации фтора наблюдаются значительные структурные изменения в приповерхностных слоях за счет проникновения в них как кислорода, так и атомов фтора, что приводит к значительному увеличению межатомного расстояния между атомами подложки, разрыву In-Sb связей, а также к формированию связей O-Sb и F-Sb. При этом начинает формироваться фторсодержащий анодный слой, с которым обычно связывают уменьшение плотности поверхностных состояний. Увеличение концентрации фтора свыше трех атомов на поверхностную (1×1) ячейку приводит к появлению дополнительных состояний в щели, вследствие их опустошения вблизи вершины валентной зоны и зарядового переноса к электроотрицательным адсорбатам.

Заключение. Проведенные расчеты из первых принципов позволили установить влияние адсорбции атомов кислорода и фтора, а также их коадсорбции на атомную и электронную структуру поверхности $\text{InSb}(111)-(1 \times 1)$ с индиевым окончанием. Показано, что адсорбция фтора над атомами индия приводит к полному или частичному удалению поверхностных состояний из запрещенной щели, индуцированных кислородом. При этом механизм понижения плотности поверхностных состояний в запрещенной щели остается аналогичным выявленному ранее для InAs и GaAs [1,2]. При увеличении концентрации фтора наблюдаются значительные структурные изменения в приповерхностных слоях.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Valisheva N.A., Aksenov M.S., Golyashov V.A., et al. Oxide-Free InAs(111)A Interface in Metal-Oxide-Semiconductor Structure with Very Low Density of States Prepared by Anodic Oxidation. Appl. Phys. Lett. – 2014. – V. 105. – P. 161601-161610.
2. Bakulin A.V., Kulkova S.E., Aksenov M.S., et al. Fluorine and Oxygen adsorption and their coadsorption on the (111) surface of InAs and GaAs // J. Phys. Chem. C. – 2016. – V. 120. – P. 17491–17500.

**ВЛИЯНИЕ КРИВИЗНЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ В ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЯХ
ОБРАЗЦОВ ТИТАНОВОГО СПЛАВА ВТ6 НА МЕХАНИЗМЫ УСТАЛОСТНОГО РАЗРУШЕНИЯ**

^{1,2}Р.Р. Хайруллин, ¹Ю.С. Бордулев, ²И.В. Власов

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. В.Е. Панин

¹Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

²ФГБУН Институт физики прочности и материаловедения,

Россия, г. Томск, пр. Академический, 2/4, 634055

E-mail: hairullin@list.ru

**EFFECT OF THE Ti-6Al-4V ALLOY SPECIMENS CRYSTAL LATTICE CURVATURE WITHIN
SURFACE LAYERS ON FATIGUE FAILURE MECHANISMS**

^{1,2}R.R. Hairullin, ¹Yu.S. Bordulev, ²I.V. Vlasov

Scientific Supervisor: Prof., Dr. V.E. Panin

¹Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

²Institute of strength physics and material science SB RAS, Russia, Tomsk, pr. Akademicheskii, 2/4, 634055

E-mail: hairullin@list.ru

***Abstract.** In the present work the role of the crystal lattice curvature in fatigue failure of Ti-6Al-4V alloy specimens was discussed. The effect of the specimens ultrasonic treatment and further electrolytic hydrogenation on their fatigue properties was revealed. It was found that the crystal lattice curvature resulted in the fatigue durability increase due to a grain boundary sliding at the boundaries of strongly dispersed phases as well as the decrease one by reason of the brittle intermetallic phase of Ti_3Al precipitation or the stabilization by hydrogen of the strong BCC β phase depending on the Ti-6Al-4V specimens structure and phase composition.*

Введение. Практически во всех отраслях строительства и техники регулярно происходят поломки машинного оборудования и конструкций вследствие явления усталости материала. В результате, создается угроза жизни и здоровью людей, а также наносятся огромные экономический и экологический ущербы. Авиация и судостроение – одни из самых подверженных усталостному разрушению отраслей, важнейшим критерием выбора материала в которых является высокая удельная прочность. Именно поэтому широкое применение в указанных отраслях находят промышленные титановые сплавы, такие как ВТ6 и ВТ23. Для повышения сопротивления усталостному разрушению конструкционных материалов активно разрабатываются технологии их обработки: нанесение упрочняющих покрытий, химико-термическая обработка, ионная имплантация и др. Особое место занимает ультразвуковая ударная обработка (УЗО), характеризующаяся относительной простотой технической реализации и низкой себестоимостью. Ранее было показано, что обработка ультразвуком технически чистого титана ВТ1-0 наноструктурирует поверхность и создает в поверхностном слое кривизну кристаллической решетки. В условиях последующего циклического нагружения затрудняется образование кривизны кристаллической решетки в сильно диспергированном α -титане. В результате, понижается количество микропор, возникающих в процессе коалесценции неравновесных вакансий, и, как следствие,

усталостная долговечность материала возрастает в 4 раза. Возникает вопрос, а как же влияет кривизна кристаллической решетки на усталостную долговечность промышленного титанового сплава ВТ6, обладающего более высокими исходными прочностными свойствами по сравнению с технически чистым титаном? Для ответа на этот вопрос необходимо всесторонне исследовать влияние УЗО на усталостные свойства сплава ВТ6. Кроме того, учитывая, что титан и его сплавы при температурах свыше 500°C очень чувствительны к водороду, приводящему к охрупчиванию, а конструкции из титана подвергаются свариванию, то необходимо дополнительно изучить влияние наводороживания на усталостные свойства сплава ВТ6, подвергнутого предварительной ударной ультразвуковой обработке.

Материалы и методы исследования. В качестве объекта исследований применялись плоские образцы, вырезанные из листа промышленного титанового сплава марки ВТ6 толщиной 1 мм. Форма и размеры вырезанных образцов менялись в зависимости от метода исследований. Все образцы разделили на 2 партии. Первая партия образцов была подвергнута рекристаллизационному отжигу в вакууме при 800 °С в течение 2 часов, вторая – была обработана ударным ультразвуком мощностью в 600 Вт. Далее с половиной образцов ВТ6, подвергнутых ультразвуковой обработке, дополнительно провели электролитическое наводороживание в течение 1 ч. Все исследуемые образцы были испытаны на многоцикловую усталость на сервогидравлической испытательной машине BISS UTM 150 с частотой 20 Гц, максимальной нагрузкой 630 МПа, асимметрией цикла $R=0,1$. Микроструктуру образцов ВТ6 исследовали методом позитронной аннигиляции в режимах анализа временного распределения аннигиляции позитронов и анализа совпадений доплеровского уширения аннигиляционной линии (цифровой спектрометр кафедры общей физики ТПУ), а также методом просвечивающей электронной микроскопии (микроскоп JEM-2100). Измерения микротвердости исследуемых образцов выполняли на микротвердомере “ПМТ-3” с нагрузкой 50 г.

Результаты. Образцы ВТ6 в рекристаллизованном состоянии характеризуются полосовой двухфазной структурой, состоящей из пластин ГПУ α -фазы и прослоек ОЦК β -фазы между ними. По данным метода позитронной аннигиляции в отожженном ВТ6 100% позитронов аннигилирует на бездефектной кристаллической решетке. Соответствующее время жизни позитронов в бездефектной решетке $\tau = 151$ пс. Микротвердость отожженных образцов ВТ6 составляет 270 кг/мм². В процессе циклической деформации образцов ВТ6 по механизму пластической дисторсии в условиях кривизны кристаллической решетки происходит образование неравновесных вакансий, которые, схлapyваясь, формируют микропоры. Микропоры приводят к расслоению материала и способствуют возникновению трещин, что обуславливает процесс усталостного разрушения.

Дальнейшая обработка образцов ВТ6 ударным ультразвуком, приводит к выделению хрупкого интерметаллида Ti_3Al из α -фазы твердого раствора $Ti-Al$. Причиной образования новой фазы является кривизна кристаллической решетки. Экспериментально методом позитронной аннигиляции наличие кривизны в образцах ВТ6, подвергнутых УЗО, подтверждается существенным повышением концентрации вакансий с 10^{-10} вакансий/узел кр.решетки до 10^{-5} вакансий/узел кр.решетки. Поскольку при комнатной температуре термических вакансий с такой высокой концентрацией быть не может, то данные вакансии являются нетермическими или неравновесными и, следовательно, образовались из-за кривизны кристаллической решетки. Формирование кривизны приводит к заполнению вакантных

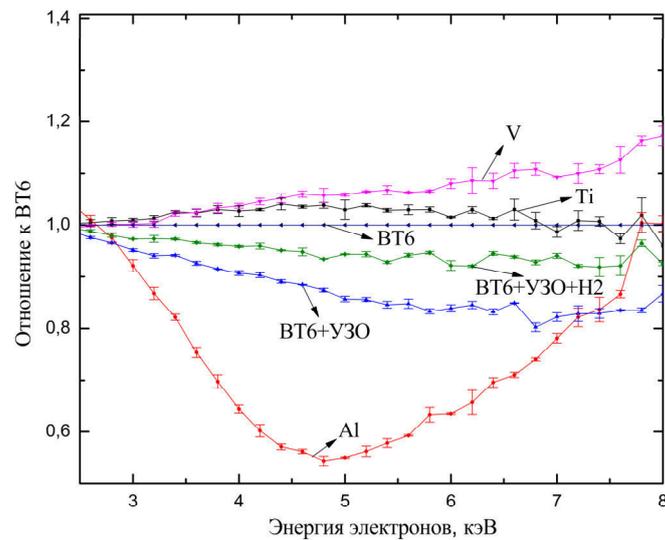


Рис. 1. Кривые распределения энергии электронов в исследуемых образцах относительно эталонного образца бездефектного ВТ6

связующих d-состояний сближенных ионов Ti s-p-электронами ионов Al (для экранировки избыточного положительного заряда) и образованию наночастиц Ti_3Al . Данный результат экспериментально подтверждается методом позитронной аннигиляции из анализа совпадений доплеровского уширения аннигиляционной линии. Как видно из рис. 1, кривая распределение энергии электронов в образцах ВТ6, подвергнутых УЗО, сместилась ближе к соответствующей кривой для деформированного алюминия. Это говорит о том, что аннигиляция позитронов происходит на возбужденных s-p-электронах Al в наночастицах Ti_3Al . Ультразвуковая обработка ВТ6 сильно диспергирует структуру. В результате, развивается кривизна кристаллической решетки, которая при дальнейшем циклическом нагружении приводит к зернограничному скольжению на интерфейсах между фазами α , β -и Ti_3Al . Зернограничное скольжение через кривизну кристаллической решетки генерирует источники дислокаций в основные α и β -фазы и вызывает их пластическую деформацию, что подтверждается уменьшением микротвердости образцов ВТ6, подвергнутых УЗО, до 220 кг/мм^2 . Однако, вследствие выпадения хрупкой фазы Ti_3Al ультразвуковая обработка ВТ6 повысила усталостную долговечность только в 1,3 раза.

Наводораживание образцов ВТ6, подвергнутых предварительной УЗО, привело к уменьшению времени жизни позитронов с 224 пс до 215 пс вследствие того, что неравновесные вакансии захватили атомы водорода, тем самым, повысив объемную электронную плотность. Водород, адсорбируясь в образованных кривизной кристаллической решетки неравновесных вакантных узлах прочной ОЦК β -фазы, стабилизировал её и заблокировал зернограничное скольжение на интерфейсах между α - и β -фазами. В результате микротвердость образцов повысилась до 370 кг/мм^2 , а усталостная долговечность понизилась в 4 раза.

Заключение. Таким образом, кривизна кристаллической решетки является главной движущей силой в пластической деформации и разрушении образцов титановых сплавов ВТ6, находящихся в различном структурном состоянии. В зависимости от структурно-фазового состава образцов ВТ6 кривизна кристаллической решетки обуславливает как увеличение усталостной долговечности за счет зернограничного скольжения на границах сильно диспергированных фаз, так и её уменьшение вследствие выпадения хрупкой интерметаллидной фазы Ti_3Al или стабилизации водородом прочной ОЦК β -фазы.

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НАНОЧАСТИЦ В РАСПЛАВЕ МЕТАЛЛА

М.Г. Хмелева, Л.Л. Миньков

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. А.Б. Ворожцов

Национальный исследовательский Томский государственный университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: khmelmg@gmail.com

PREDICT THE DISTRIBUTION OF NANOPARTICLES IN MOLTEN METAL

M.G. Khmeleva, L.L. Minkov

Scientific Supervisor: Prof., Dr. A.B. Vorozhtsov

Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: khmelmg@gmail.com

***Abstract.** In the present study the results of mathematical modeling of the process of introducing particles into an aluminum melt using the mixing device. A pattern of the distribution of these particles in the melt is obtained.*

Введение. В настоящее время отмечается значительный интерес к расширению области применения алюминиевых сплавов [1-3]. В этой связи поиск путей повышения комплекса их механических и функциональных свойств является важным, как с точки зрения фундаментальной науки, так и с позиций разработки новых материалов на основе алюминия.

Модифицирование различными наночастицами является наиболее распространенным способом управления структурой и свойствами алюминиевых сплавов [4,5]. При этом варьируемыми параметрами могут быть количество, размер, морфология вводимых наночастиц, время выдержки расплава после модифицирования. Для введения и равномерного распределения наночастиц в расплаве металла применяют специально разработанное перемешивающее устройство [6]. Также это устройство за счет воздействия вибрации на расплав используется для освобождения расплавов металлов от растворенных в них газов, которые являются причиной брака отливок (газовая пористость).

Таким образом, при модифицировании сплава различными наночастицами необходимо уметь предсказать поведение этих наночастиц в расплаве металла. Целью настоящей работы является - методами численного моделирования выявить особенности и закономерности поведения наночастиц в расплаве металла, содержащемся в тигле, под воздействием перемешивающего устройства.

Постановка задачи. В физической постановке задачи рассматривается тигель цилиндрической формы, в который помещается перемешивающее устройство [6]. За основу описания физического процесса принята модель, содержащая следующие допущения: жидкость несжимаемая, процесс перемешивания – нестационарный, изотермический и турбулентный, течение – закрученное. Для описания положения границы жидкий металл – воздух используется модель VOF, для описания турбулентного течения принята классическая k-ε модель. Система основных уравнений, описывающих процесс турбулентного течения расплавленного металла в перемешивающем устройстве [7], дополнена уравнением изменения положения и скорости частиц в рамках концепции «модель дискретных частиц» [8].

Алгоритм решения задачи строится следующим образом: сначала решается задача об установлении поля течения жидкого металла в перемешивающем устройстве, затем рассматривается эволюция наночастиц модификатора, помещенных между дисками завихрителя.

Результаты. На рисунке 1 показано изменение положения частиц модификатора размером 1 мкм в расплавленном металле с течением времени. Цвет частиц соответствует расстоянию частиц от оси вращения в начальный момент времени. Синий цвет соответствует частицам, расположенным вблизи оси вращения, красный цвет – частицам на периферии завихрителя, а зеленый и желтый – в промежуточной зоне, рисунок 1а. Поле течения расплавленного металла увлекает частицы из междискового пространства завихрителя на периферию тигля, рисунок 1б. К моменту времени 5 с, частицы модификатора равномерно распределены по расплавленному металлу, за исключением области, находящейся в приосевой зоне под завихрителем.

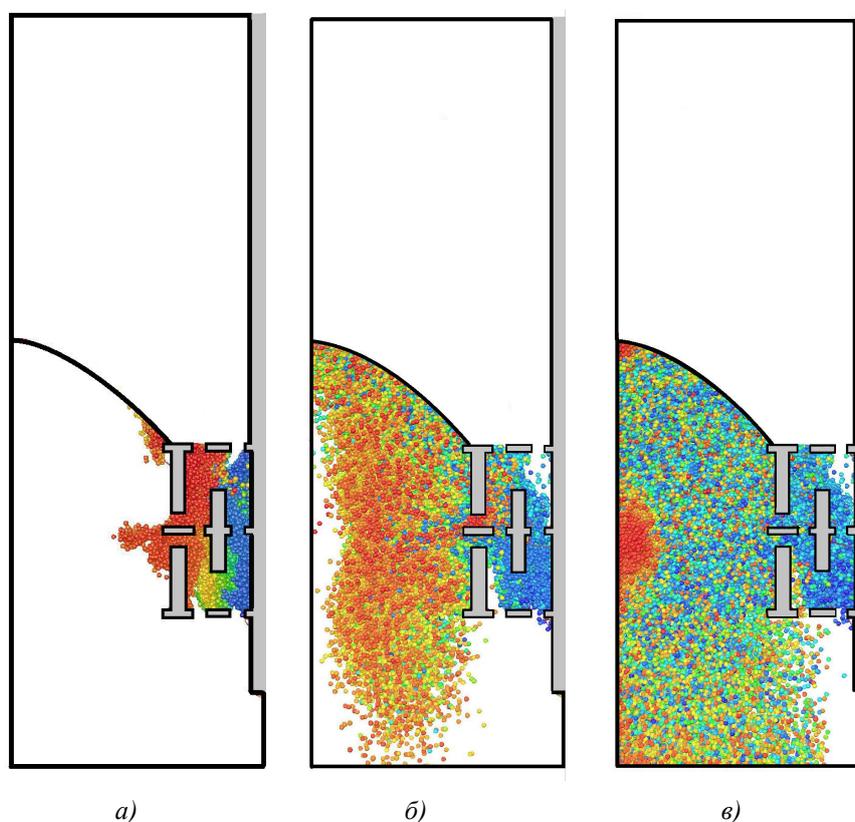


Рис. 1. Изменение положения частиц со временем.

$a - t=0.1 \text{ с}$, $b - t=1 \text{ с}$, $v - t=5 \text{ с}$,

Заключение. Результаты численного моделирования демонстрируют распределение наночастиц в расплаве металла и могут служить эффективным инструментом для принятия решений при модифицировании алюминиевых сплавов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 17-13-01252).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Davis J.R. (2001) Alloying: Understanding the Basics, pp. 351–416.
2. Miller W.S., Zhuang L., Bottema J., Wittebrood A.J., Smet P. De, Haszler A., Vieregge A. (2000) Recent development in aluminium alloys for the automotive industry. *Materials Science and Engineering A280*, pp. 37–49.
3. Robles-Hernandez F.C., Ramírez J.M.H., Mackay R. (2017). Al-Si Alloys, Minor, Major, and Impurity Elements, *Al-Si Alloys*, pp. 1–15.
4. Vorozhtsov S., Minkov L., Dammer V., Khrustalyov A., Zhukov I., Promakhov V., Vorozhtsov A. and Khmeleva M. (2017). Ex Situ Introduction and Distribution of Nonmetallic Particles in Aluminum Melt: Modeling and Experiment. *JOM*, Vol. 69, No. 12.
5. Сакович Г.В., Ворожцов С.А., Ворожцов А.Б., Потекаев А.И., Кульков С.Н. Физико-механические свойства композитов и легких сплавов, упрочненных детонационными наноалмазами // *Известия ВУЗов. Физика*. – 2016. – Т. 59, № 3. – С. 104-109.
6. Пат. 2625471 РФ, МПК В01F 7/18, В01F 7/26. Устройство для смешивания жидкостей и порошков с жидкостью / А.Б. Ворожцов, В.А. Архипов, Э.Р. Шрагер, В.Х. Даммер, С.А. Ворожцов, М.Г. Хмелева; опубл. 14.07.2017, Бюл. № 20.
7. Хмелева М.Г., Даммер В.Х., Тохметова А.Б., Миньков Л.Л. Численное моделирование вихреобразования в жидком металле под действием дискового завихрителя // *Вестник Томского государственного университета. Математика и механика*. – 2017. – № 46.– С. 76-85.
8. Manninen M. On the mixture model for multiphase flow. VTT Publications 288 / M. Manninen, V. Taivassalo, S. Kallio. Technical Research Centre of Finland, Espoo, 1996.

**СТРУКТУРНО-ФАЗОВОЕ СОСТОЯНИЕ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОГО ТИТАНОВОГО СПЛАВА VT16**

А.О. Хованова

Научный руководитель: д.ф.-м.н. Г.П. Грабовецкая

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: anastasia_khovanova@mail.ru

**STRUCTURAL AND PHASE STATES AND MECHANICAL PROPERTIES
OF ULTRAFINE-GRAINED VT16 ALLOY**

A.O.Khovanova

Scientific Supervisor: Dr. G.P. Grabovetskaya

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: grabg@ispms.tsc.ru

***Abstract.** The influence of preliminary hydrogenation on the formation of the ultrafine-grained structure in titanium alloy of the Ti-Al-V-Mo system under severe plastic deformation was investigated. The effect of hydrogen presence on the mechanical properties of ultrafine-grained structure was also studied.*

Введение. Титановые сплавы вследствие их высокой коррозионной стойкости, биосовместимости и низкой плотности широко используются в судостроении, аэрокосмической промышленности, а также в медицине. Поэтому вопрос о повышении их прочностных и эксплуатационных характеристик особенно важен. Эффективным способом повышения прочностных свойств титановых сплавов является измельчение зерен до нано – и/или субмикронного размера методами интенсивной пластической деформации (ИПД) [1]. Однако титановые сплавы являются труднодеформируемыми материалами. Известно [2], что повысить пластичность и снизить энергетические затраты при деформировании титановых сплавов можно путем временного введения в их объем водорода.

Целью работы является исследование влияния водорода на формирование ультрамелкозернистой структуры и ее свойств в сплаве системы Ti-Al-V-Mo (марка VT16).

Материалы и методы исследования. Для исследования использовали промышленный двухфазный ($\alpha+\beta$) титановый сплав системы Ti-Al-V-Mo с содержанием водорода 0,002-0,9 мас.%. (далее VT16-H).

Наводороживание сплава осуществляли путем отжига заготовок в среде водорода в высоковакуумной установке типа Сиверста (марка РС1М) при температуре 873 К. Ультрамелкозернистое состояние в исследуемом сплаве было получено методом прессования со сменой оси деформации при температурах 923 и 823 К. Было проведено 2 цикла прессования, каждый из которых состоял из трех сжатий. Деформация заготовки за одно сжатие составляла 50%.

Структуру сплавов VT16-H исследовали с помощью оптического (марка AXIOVERT-200MAT) и просвечивающего электронного (марки JEM-2100) микроскопов. Фольги для исследования структуры были приготовлены методом механического шлифования и последующей электролитической

полировкой с использованием прибора «МИКРОН». Размеры структурных элементов определяли стандартным методом секущей по темнопольным изображениям.

Измерение микротвердости (H_{μ}) проводили стандартным методом на микротвердомере ПМТ-3 с помощью алмазной пирамиды Виккерса с нагрузкой 0,1 кг. Время нагружения составляло 15 секунд.

Результаты. Металлографические исследования микроструктуры показали, что наводороженный до концентраций 0,14-0,9 мас.% сплав ВТ16 (далее ВТ16-Н) имеет крупнозернистую пластинчатую структуру, состоящую из смеси α , α'' , β фаз (рис.1).

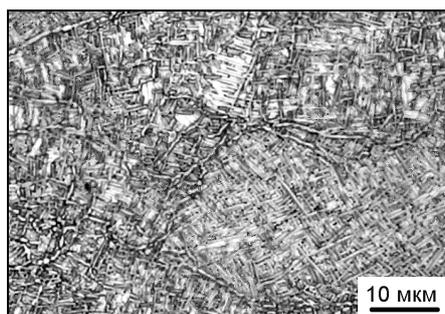


Рис.1. Оптическое изображение микроструктуры сплава ВТ16-Н

После прессования по указанному режиму в сплаве ВТ16-Н с содержанием водорода 0,14-0,27 мас.% формируется двухфазная ($\alpha+\beta$) однородная ультрамелкозернистая структура. Типичное электронно-микроскопическое изображение такой УМЗ структуры представлено на рис.2.

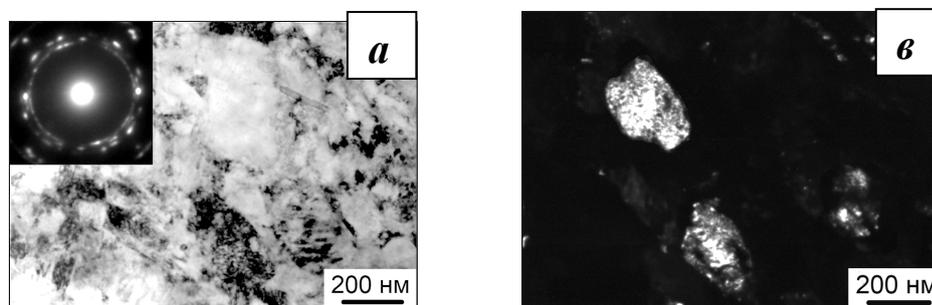


Рис. 2. Электронно-микроскопическое изображение микроструктуры ультрамелкозернистого сплава ВТ16-0,27 Н

На светлопольном изображении ультрамелкозернистой структуры сплава ВТ16-0,27 Н (рис. 2, а) виден сложный деформационный контраст, не позволяющий различить элементы структуры. На электроннограммах такой структуры (рис. 2, а) наблюдаются дифракционные кольца, образованные рефлексами от отдельных зерен. При этом некоторые рефлексы имеют азимутальное размытие, что свидетельствует о присутствии внутренних напряжений в зернах. На темнопольном изображении (рис.2, б) достаточно хорошо видны отдельные элементы структуры, средний размер которых составляет $\sim 0,26$ мкм. Следует отметить, что подобная ультрамелкозернистая структура в сплаве ВТ16-0,002 формируется в результате 5 циклов прессования с постепенным понижением температуры в интервале 1023-823 К [3].

На рис. 3. представлена зависимость величины H_{μ} от концентрации водорода в сплавах ВТ16 после прессования. Видно, что формирование ультрамелкозернистой структуры в сплаве с

концентрацией водорода 0,002 мас.% по указанному выше режиму приводит к увеличению H_{μ} примерно в 1,3 раза. Присутствие водорода в сплаве в количестве 0,15 мас.% приводит к дальнейшему увеличению H_{μ} . Это может быть связано с твердорастворным упрочнением сплава. При повышении концентрации водорода в сплаве до 0,48 масс.% наблюдается снижение значений H_{μ} . Водород в титановых сплавах является стабилизатором β -фазы, поэтому повышении его концентрации в сплаве может приводить к увеличению объемной доли β -фазы, прочностные характеристики которой ниже по сравнению с α -фазой. Поэтому можно предположить, что уменьшение величины H_{μ} ультрамелкозернистого сплава VT16 с увеличением концентрации водорода связано с ростом в сплаве объемной доли β -фазы. Это предположение требует более подробного исследования.

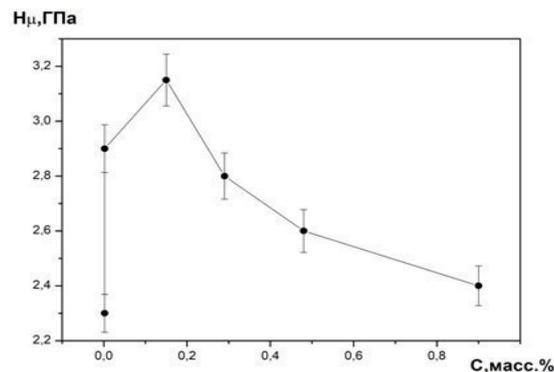


Рис.3. График зависимости микротвердости от концентрации водорода ультрамелкозернистого сплава VT16-H

Заключение. Использование метода, сочетающего предварительное наводороживание и интенсивную пластическую деформацию прессованием, позволяет снизить температуру прессования с 1023 до 923 К и уменьшить число циклов прессования с 5 до 2 при формировании в сплаве VT16-H ультрамелкозернистой структуры. Формирование ультрамелкозернистой структуры и присутствие водорода в твердом растворе приводит к повышению микротвердости VT16.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Колобов Ю.Р., Валиев Р.З., Грабовецкая Г.П., Жилиев А.П., Дударев Е.Ф., Иванов К.В., Кашин М.Б., Найденкин Е.В. Зернограничная диффузия и свойства наноструктурных материалов, Новосибирск. Наука, 2001. – 232 с.
2. Ильин А.А., Мамонтов А.М., Коллеров М.Ю. Научные основы и принципы построения технологических процессов термоводородной обработки титановых сплавов // Мет. – 1994. – №4. – С. 57–167.
3. Грабовецкая Г.П., Раточка И.В., Мишин И.П., Забудченко О.В., Лыкова О.Н. Эволюция структурно-фазового состояния титанового сплава системы Ti-Al-V-Mo в процессе интенсивной пластической деформации и последующих отжигов // Изв. Выс. Учеб. Зав. Физика.– 2016.– Т.59, №1.– С. 92–97.

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ БЕЗГАЗОВОГО ГОРЕНИЯ СИСТЕМЫ
СОПРЯЖЕННЫХ СЛОЕВ НА ОСНОВЕ СОСТАВОВ TI+AL И NI+AL**Т. И. Худякова^{1,2}Научный руководитель: профессор, ф. м. н. В. Г. Прокофьев¹¹Национальный исследовательский Томский государственный университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050

²Томский научный центр СО РАН, Россия, г. Томск, Академический пр., 10/3, 634055E-mail: tai_hudikova@mail.ru**MATHEMATICAL MODELING OF THE GAS-FREE COMBUSTION OF THE SYSTEM OF
CONJUGATED LAYERS BASED ON THE COMPOSITIONS OF TI + AL AND NI + AL**T.I. Hudyakova^{1,2}Scientific Supervisor: Prof., Dr. V. G. Prokofiev¹,¹Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050²Tomsk Scientific Center of the SB RAS, Russia, Tomsk, Academic str., 10/3, 634055E-mail: tai_hudikova@mail.ru

***Abstract.** In the present study was carried out the gas-free combustion of a system of conjugated layers based on the composition of Ti + Al and Ni + Al. A numerical solution is obtained based on mathematical simulation of the synthesis of a layer system in a two-dimensional plane-symmetric formulation. The optimal distribution of the acceptor and donor layers was founded.*

Введение. Создание композиционных материалов, содержащих акцепторные и донорные слои с различными теплофизическими параметрами, является одним из направлений метода самораспространяющегося высокотемпературного синтеза. С помощью эффекта «химичкой печки», что является дополнительным источником тепла, вследствие протекания сильной экзотермической реакции можно добиться синтеза плохо реагирующих между собой систем [1]. Для формирования композита нужно знать теплофизические и формально-кинетические параметры реагирующей порошковой смеси. В работе [2], проведены численные исследования синтеза слоевого материала в условиях сопряженного теплообмена и установлено существенное влияние теплофизических свойств инертных материалов на распределение температуры в стационарных и нестационарных режимах.

Целью данной работы является нахождение такого соотношения и распределения акцепторного и донорного слоев порошковых смесей Ni+Al (донорный состав) и Ti+Al (акцепторный состав), при котором реализуется наиболее оптимальный режим синтеза слоевого композита.

Материалы и методы исследования. Физическая постановка задачи заключается в последовательном комбинировании сопряженных слоев: акцепторного (Ti+Al) и донорного (Ni+Al). Зажигание образца выполняется с помощью кратковременного контактирования с накаливаемой поверхностью всех слоев системы. Поверхность слоевого композита, противоположная плоскости зажигания, теплоизолирована. Безразмерное время контакта системы с накаливаемой поверхностью при всех вычислениях оставалась постоянной $\tau_{ign} = 500$.

Получено численное решение на основе математического моделирования синтеза слоевой системы в двумерной плоскосимметричной постановке [3], включающее в себя следующие уравнения:

Уравнение теплопроводности:

$$c(\xi) \frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\lambda(\xi) \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right) + \lambda(\xi) \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} + \frac{1}{\gamma} \frac{\partial \eta}{\partial \tau},$$

Уравнение химической кинетики:

$$\frac{\partial \eta}{\partial \tau} = \gamma(1-\eta) \exp \frac{\sigma \theta}{1 + \Lambda \Gamma \theta} \quad (\xi_1 < \xi < \xi_1 + \xi_0), \text{ где } \xi_0 \text{ — толщина активного слоя.}$$

Краевые условия задачи:

$$\tau \leq \tau_{\text{ign}} : \theta(0, \xi, \tau) = 0, \quad \tau > \tau_{\text{ign}} : \frac{\partial \theta(0, \xi, \tau)}{\partial z} = 0, \quad \xi = \xi_0 : \theta_1 = \theta_2, \quad \Lambda \frac{\partial \theta_1}{\partial \xi} = \frac{\partial \theta_2}{\partial \xi}, \quad \frac{\partial \theta(L, \xi, \tau)}{\partial z} = 0,$$

$$\frac{\partial \theta_2(z, Y, \tau)}{\partial \xi} + \alpha_t [\theta_2(z, Y, \tau) - \theta_0] = 0, \quad \theta(z, \xi, 0) = \theta_0, \quad \eta(z, \xi, 0) = 0.$$

Результаты. В ходе численного решения задачи было найдено полное время горения слоевой системы в зависимости от отношения компонентов слоев и начальной температуры для трехслойной композиции рис. 1. При расчетах вводились следующие соотношения: N – количество слоевых пар, y – толщина донорного слоя, τ_0 – время горения образца, сформированного только из донорной смеси.

При увеличении начальной температуры, время прохождения химической реакции значительно уменьшается.

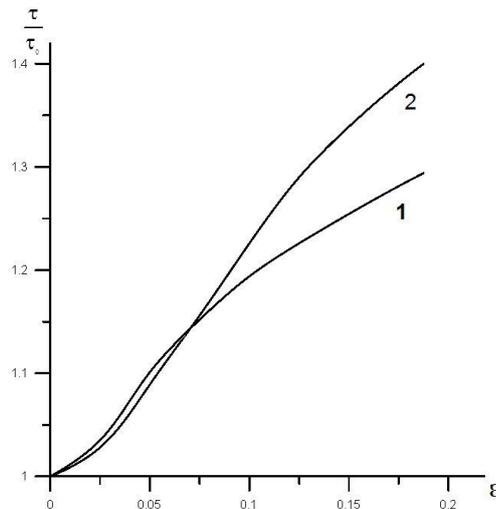


Рис. 1. Время полного горения слоевой системы

$$(1: \theta_0 = -6,53, 2: \theta_0 = -7,46, \varepsilon = \frac{N * y}{Y})$$

Однако при начальной температуре $\theta_0 = -7,46$, нарушается предел устойчивости горения системы. Рассчитано время горения образца в зависимости от количества слоевых пар донор-акцептор и их объёмного содержания в образце рис.2.

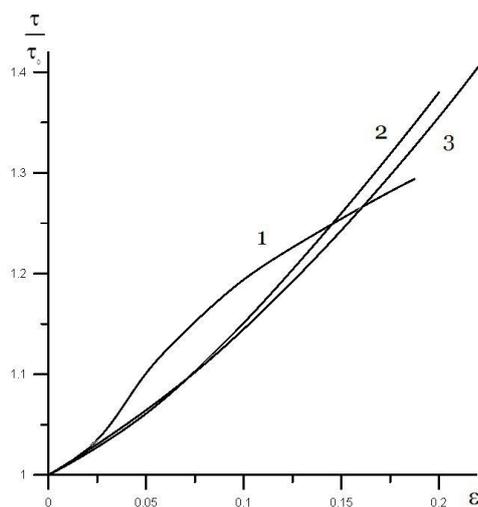


Рис. 2. Зависимость времени горения образца от количества слоев пар
(1: $N = 2$, 2: $N=4$, 3: $N=6$, $\theta_0 = -6,53$)

Из рисунка 2 видно, что при количестве слоев пар $N=6$, происходит наиболее быстрое горение системы сопряженных слоев.

Выводы. Для создания слоевого композита из определенного соотношения акцепторных и донорных слоев, самым оптимальным соотношением будет разбиение акцепторных и донорных слоев на 6 пар. При таком задании параметров происходит наиболее быстрое горение системы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Мержанов А.Г. Термически сопряженные процессы самораспространяющегося высокотемпературного синтеза // Доклады академии наук. – 2010. – Т. 434. – №4. – С. 489–492.
2. Алигожина К.А. Моделирование распространения твердофазной реакции в условиях сопряженного теплообмена / К.А Алигожина, А. Г. Князева. // Физика горения и взрыва. – 2017. – Т.53. – №4. С. 48–57.
3. Прокофьев В. Г., Смоляков В. К. Безгазовое горение системы термически сопряженных слоев. // Физика горения и взрыва. – 2016. – Т.52. – №1. – С. 70–75.

**ВЛИЯНИЕ ДЕФЕКТНОЙ СТРУКТУРЫ И РЕЖИМОВ ХИМИКО-ТЕРМИЧЕСКОЙ
ОБРАБОТКИ НА КОНЦЕНТРАЦИЮ КИСЛОРОДА В СПЛАВЕ СИСТЕМЫ V–Cr–Zr–Ta**

А.С. Цверова¹, И.В. Смирнов^{1,2}, К.В. Гриняев^{1,2}

Научный руководитель: профессор, д.ф-м.н. А.Н. Тюменцев^{1,2}

¹ Томский государственный университет, Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050

² Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Россия,

г. Томск, пр. Академический, 2/4, 634055

E-mail: tsverova@mail.ru

**INFLUENCE OF DEFECT STRUCTURE AND CHEMICAL-HEAT TREATMENT MODES ON
OXYGEN CONCENTRATION IN V-Cr-Zr-Ta ALLOY**

A.S. Tsverova¹, I.V. Smirnov^{1,2}, K.V. Grinyaev^{1,2}

Scientific Supervisor: professor, PhD A.N. Tumentsev

¹ Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenina str., 36, 634050

² Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Russia, Tomsk, Akademicheskii str, 2/4, 634055

E-mail: tsverova@mail.ru

***Abstract.** This work presents investigation of influence of the defect structure and chemical-heat treatment duration on oxygen concentration in the vanadium based alloy. It was found that with the increasing of plastic deformation degree oxygen concentration increases due to grain refining and dislocation density increasing. Mechanical properties investigations show that the increasing of oxygen concentration leads to significant microhardness increasing.*

Введение. Хорошо известно, что сплавы на основе ванадия характеризуются высокой химической активностью к примесям внедрения (O, C, N) [1]. Повышение концентрации последних приводит к формированию твердых растворов и частиц вторых фаз, что переводит такие материалы в разряд гетерофазных. Для модификации структурно-фазового состояния этих материалов в настоящее время применяются методы термомеханической (ТМО) [2, 3] и химико-термической обработок (ХТО) [4]. Авторами [4] показано, что именно применение ХТО с формированием жаростойкой оксидной фазы обеспечивает существенный рост прочностных свойств при высоких температурах. В то же время на фоне существенного увеличения прочности окисленных ванадиевых сплавов часто наблюдается резкое снижение их пластичности. Таким образом, для контролируемого обеспечения оптимального сочетания прочности и пластичности при реализации ХТО необходим учет ключевых факторов, определяющих скорость легирования кислородом, в том числе в зависимости от элементного состава матрицы сплава.

В настоящей работе проведено исследование влияния дефектной структуры и продолжительности химико-термической обработки на концентрацию кислорода в малоактивируемом ванадиевом сплаве системы V–Cr–Zr–Ta.

Материалы и методы исследования. В работе использован сплав V–6.80 Cr–6.10 Ta–0.79 Zr–0.031 C–0.052 O–0.009 N (вес. %) (V–Cr–Zr–Ta), образцы которого подвергали термомеханической обработке (ТМО I) [3]. После ТМО проведен стабилизирующий часовой отжиг в вакууме при 1100 °С.

Последующую деформацию образцов осуществляли прокаткой при комнатной температуре ($e = 0.7$ и 1.6). Далее образцы после заключительного отжига и указанных степеней деформации подвергали ХТО методом низкотемпературного диффузионного легирования по режиму [4]. При этом отжиг на воздухе, являющийся одним из этапов данной ХТО, проводился в течение $t_0 = 1.5, 3$ или 6 часов.

Исследование микроструктуры проведено с использованием методов просвечивающей электронной микроскопии [5] и метода дифракции обратно рассеянных электронов. Микротвердость образцов после различных этапов деформационного, термического и химико-термического воздействия определяли методом Виккерса. Измерения проводили в центральной части образцов.

Результаты и их обсуждение. После ТМО I и отжига при $1100\text{ }^\circ\text{C}$ наблюдается преимущественное формирование мелкокристаллической ($3 - 15$ мкм) зеренной фракции и отдельных крупных зерен (30 мкм и более) (таблица 1). Последующая деформация прокаткой (до $e = 0.7$) приводит к формированию анизотропного структурного состояния. Исходные зерна вытягиваются в направлении прокатки, образуя полосы длиной от нескольких десятков мкм до сотен мкм, ширина которых составляет $10 - 15$ мкм. Внутри зерен наблюдаются структурные состояния, характеризующиеся непрерывным изменением ориентации кристаллической решетки. Увеличение степени деформации до $e = 1.6$ помимо формоизменения сопровождается процессами фрагментации на полосы шириной не более 5 мкм. Скалярная плотность дислокаций (ρ_c) внутри зерен после ТМО I и отжига при $1100\text{ }^\circ\text{C}$ не превышает значений $\approx 10^{10}\text{ см}^{-2}$. После $e = 0.7$ ρ_c увеличивается до $(2.5 - 3.0) \cdot 10^{10}\text{ см}^{-2}$, а при $e = 1.6$ – до $(3.3 - 4.1) \cdot 10^{10}\text{ см}^{-2}$. При этом установлено, что после $e = 0.7$ в материале появляются субструктуры, характеризующиеся кривизной кристаллической решетки (χ_{ij}) до 5 град/мкм. Увеличение e до 1.6 сопровождается появлением отдельных участков, в которых χ_{ij} достигает $10 - 15$ град/мкм (таблица 1).

Таблица 1

Параметры зеренной и субзеренной структуры (d), значения скалярной плотности дислокаций (ρ_c) и кривизны кристаллической решетки (χ_{ij})

Состояние	Размер зерен, мкм	$\rho_c, \text{ см}^{-2}$	$\chi_{ij}, \text{ град/мкм}$
Исходное [11] ТМО I, $1100\text{ }^\circ\text{C}$	$d_{\text{мел.ф.}} \approx 3 - 15$ мкм; $d_{\text{кр.ф.}} \approx 30 - 100$ мкм	$\sim 10^{10}$	–
ТМО I, $1100\text{ }^\circ\text{C}$ $e = 0.7$	$d_{\perp} \approx 10 - 15$ мкм; $d_{\parallel} \approx 15 - 100$ мкм; $d_{\text{субз.}} \approx 0.3 - 3$ мкм	$(2.5 - 3.0) \cdot 10^{10}$	≤ 5
ТМО I, $1100\text{ }^\circ\text{C}$ $e = 1.6$	$d_{\perp} \leq 5$ мкм; $d_{\parallel} \approx 50 - 300$ мкм; $d_{\text{субз.}} \approx 0.3 - 3$ мкм	$(3.3 - 4.1) \cdot 10^{10}$	$5 - 15$

$d_{\text{мел.ф.}}$ и $d_{\text{кр.ф.}}$ – размеры зерен мелкой и крупной фракций; d_{\perp} – размер зерен в направлении, перпендикулярном направлению прокатки; d_{\parallel} – размер зерен в направлении прокатки; $d_{\text{субз.}}$ – размер субзерен; χ_{ij} – значения компонент тензора изгиба кручения [5].

Анализ и сопоставление результатов позволяют наглядно продемонстрировать (таблица 2), что такие структурные изменения при увеличении степени деформации способствуют существенному росту значений концентрации вводимого кислорода.

Таблица 2

Концентрация вводимого кислорода (C_O) и значения микротвердости (H_{μ}) сплава V–Cr–Ta–Zr

t_0 , ч	1100 °С		1100 °С + ($e = 0.7$)		1100 °С + ($e = 1.6$)	
	C_O , ат. %	H_{μ} , ГПа	C_O , ат. %	H_{μ} , ГПа	C_O , ат. %	H_{μ} , ГПа
–	–	1.49	–	2.13	–	2.42
$t_0 = 1.5$	1.10	1.57	2.26	3.51	4.51	6.17
$t_0 = 3.0$	1.13	1.61	2.40	3.71	5.17	6.89
$t_0 = 6.0$	1.33	2.34	2.67	3.88	5.71	8.31

Исследование процессов окисления показало, что коэффициент (k), характеризующий скорость окисления сплава в процессе ХТО, значительно зависит от предварительной обработки. В частности, после отжига при 1100 °С, k составляет $\approx 1.40 \cdot 10^{-10}$ кг/(м² · с). Последующая прокатка до $e = 0.7$ приводит к увеличению k на ≈ 3 % ($k \approx 1.44 \cdot 10^{-10}$ кг/(м² · с)), а после деформации до $e = 1.6$ наблюдается существенное повышение k на ≈ 13 % ($k \approx 1.58 \cdot 10^{-10}$ кг/(м² · с)).

Кроме того, изучение механических свойств сплава V–Cr–Zr–Ta на разных этапах обработки позволило установить, что увеличение концентрации вводимого кислорода в интервале 1.10 ÷ 5.72 ат. % приводит к практически линейному увеличению значений микротвердости от 1.57 ГПа до 8.31 ГПа.

Заключение. Установлено, что измельчение зеренной структуры и повышение ρ_s в результате пластической деформации приводит к увеличению коэффициента окисления (k) сплава V–Cr–Zr–Ta и, соответственно, к повышению концентрации вводимого кислорода. Показано, что рост концентрации кислорода при ХТО способствует увеличению значений микротвердости изучаемого сплава.

Авторы выражают благодарность Дитенбергу И.А., Тюменцеву А.Н., Чернову В.М. за организацию исследовательской работы и обсуждение полученных результатов. Результаты получены с использованием оборудования Томского материаловедческого центра коллективного пользования ТГУ. Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-08-00213_А.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Фромм Е., Гебхардт Е. Газы и углерод в металлах. – М.: Металлургия, 1980. – 712 с.
2. Chen J.M., Chernov V.M., Kurtz R.J. Muroga T. Overview of the vanadium alloy researches for fusion reactors // Journal of Nuclear Materials. – 2011. – V. 417. – P. 289–294.
3. Tyumentsev A.N., Ditenberg I.A., Grinyaev K.V. et al. The Effect of Thermomechanical Treatment Regimes on Microstructure and Mechanical Properties of V–Me(Cr, W)–Zr–C Alloys // Physics of Atomic Nuclei. – 2015. – Vol. 78. – № 10. – P. 1092–1099.
4. Potapenko M.M., Chernov V.M., Drobyshev V.A. et al. Microstructure and mechanical properties of V–4Ti–4Cr alloy as a function of the chemical heat treatment regimes // Physics of Atomic Nuclei. – 2015. – V. 78. – № 10. – P. 1087–1091.
5. Тюменцев А.Н., Дитенберг И.А. Структурные состояния с высокой кривизной кристаллической решетки в субмикроструктурных и нанокристаллических металлических материалах // Известия вузов. Физика. – 2011. – № 9. – С. 26–36.

**ПРИМЕНЕНИЕ ПОЗИТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ
СТРУКТУРЫ ПРИРОДНЫХ ПОЛИМЕРОВ НА ПРИМЕРЕ СОСНЫ СИБИРСКОЙ
КЕДРОВОЙ**

Цуй Цзян, Р.С. Лаптев, Ю.С. Бордулев

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. К.П. Арефьев

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: ttsyuan@mail.ru

**APPLICATION OF POSITRON SPECTROSCOPY FOR INVESTIGATION OF THE NATURAL
POLYMERS STRUCTURE ON THE EXAMPLE OF SIBERIAN PINE**

Cui Jian, R.S. Laptev, Yu.S. Bordulev

Scientific Supervisor: Prof., Dr. K.P. Arefiev

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: ttsyuan@mail.ru

***Abstract.** In the present study, we performed the experimental study of wood structures by positron annihilation. The measurements were carried out on the positron lifetime spectrometer. The other two components are associated with the annihilation of ortho-positronium in liquids and gases filling the intra- and intercellular spaces of the wood. On the basis of experimental studies, a century old Siberian pine has been cut, the changes in the solid, liquid, and gas components of wood are dated.*

Введение. Растения подвержены действию многих факторов. В различной степени на них влияют температура окружающей среды, дефицит влаги, повышенное содержание в атмосфере CO₂, присутствие в почве тяжелых металлов. Известно, что стресс у деревьев вызывает изменение дозы УФ радиации, дошедшей до поверхности земли и повышение концентрации токсичного тропосферного озона, особенно в промышленной зоне. Все это приводит к изменениям годичного прироста деревьев [1,2].

Позитронная аннигиляционная спектроскопия (ПАС) является современным методом изучения структуры вещества [3,4].

Первая задача – оценить насколько возможно применение этого метода к сложному многокомпонентному по своей структуре объекту, каковы требования к форме образцов для исследования и дискретность датировки характеристик образцов.

Дальнейшие цели: выявить и датировать изменения древесины клеточных стенок в растущем дереве для твердотельной, жидкой и газовой составляющих древесины.

Материал и методы исследования. Спектрометр был реализован на основе быстро-быстрой схемы. В качестве детекторов использовались сцинтилляционные детекторы Hamamatsu H3378-50 на основе кристаллов BaF₂ цилиндрической формы, диаметром 30мм и толщиной 25 мм. Питание детекторов осуществлялось с помощью высоковольтного источника питания (ВИП, NHQ 203M). Спектрометрический комплекс включает в себя два дифференциальных дискриминатора постоянной составляющей (ДПС, FAST ComTech 7029A), блок наносекундной задержки (БНЗ, Canberra 2058), время-

цифровой преобразователь (ВЦП, FAST ComTech 7072Т), многопараметровый многоканальный анализатор (МРА 4) и персональный компьютер с программным обеспечением для набора спектров (ПК). Схема спектрометрического комплекса представлена на рисунке 1.

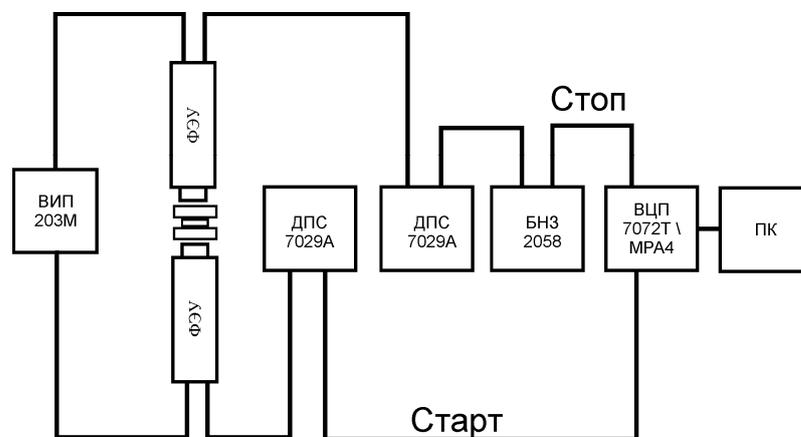


Рис. 1. Схема спектрометрического комплекса

Регистрация ядерного γ -кванта, с энергией 1,157 МэВ, является сигналом «старт», а регистрация аннигиляционного кванта, с энергией близкой к 0,511 кэВ, является сигналом «стоп». Время между двумя этими сигналами и является временем жизни позитрона в веществе. Импульсы с детекторов поступают на дифференциальные дискриминаторы, где осуществляется амплитудная селекция и привязка к временному фронту. Аналоговый сигнал с анода детектора «стоп» поступает на ДПС. Пороги дискриминации на нем установлены так, чтобы захватить область только аннигиляционного пика. Аналогично с сигналами «стоп». Пороги установлены таким образом, чтобы провести селекцию импульсов, соответствующих ядерным γ -квантам [5].

Результаты исследований. В процессе анализа полученных данных было выделено 3 компоненты: 1 короткоживущая и 2 долгоживущие $\tau_1=373,4\pm 0,2$ пс, $\tau_2=1494,3\pm 4,1$ пс, $\tau_3=2757,5\pm 23,8$ пс. Первую компоненту, с относительной интенсивностью $\sim 80\%$, можно однозначно связать с аннигиляцией позитронов в твердом теле (целлюлоза, лигнин и т.д.). Компонента τ_2 , в соответствии с известными литературными данными ассоциируется с орто-позитронием в жидкостях (H_2O , смолы и т.д.), заполняющими внутри- и меж-клеточные пространства древесины. Третья компонента разложения ассоциируется с аннигиляцией орто-позитрония в газах (CO_2 , N_2 , O_2 и т.д.), также в внутри- и меж-клеточных пространствах древесины. На рисунке 2 представлены интенсивности разных компонент разложения в зависимости от слоя. Компонента τ_1 , с интенсивностью 80%, вносит основной вклад, поэтому характер зависимости среднего времени жизни τ_{avg} от слоя совпадает с характером зависимости τ_1 . Уменьшение среднего времени жизни может свидетельствовать об увеличении плотности при приближении к более «старым» годовым кольцам.

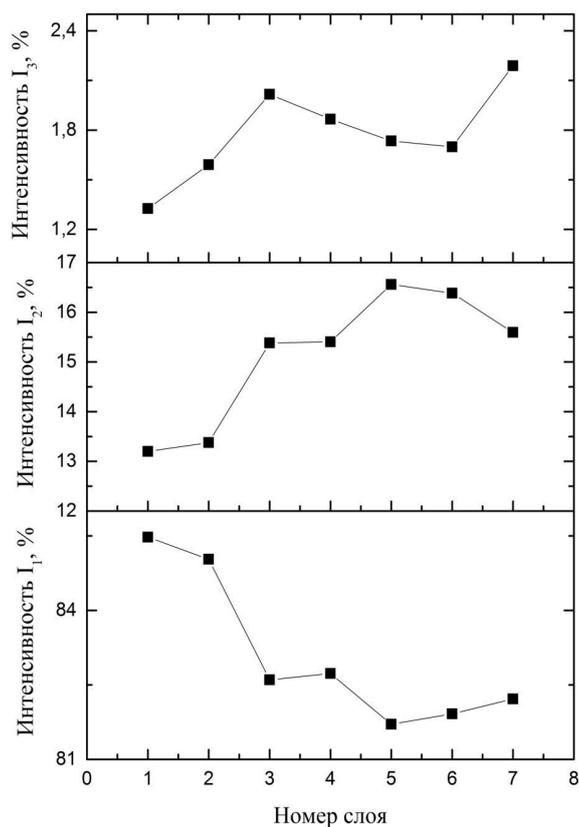


Рис 2. Изменение интенсивности компонент τ_1 , τ_2 и τ_3 в зависимости от слоя.

Заключение. Таким образом, ПАС является перспективным методом неразрушающего контроля структуры материалов, применяющимся в разных отраслях науки и техники. Дальнейшее исследование в области ПАС и использование его в связке с другими методами поможет в разработке новых материалов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Биоиндикация стратосферного озона // Под общей ред. В. В. Зуева; Рос. акад. наук, Сиб. отд., Институт оптики атмосферы [и др.]. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2006. – 228 с.
2. П.А. Кашулин, Н.В. Калачева, Н.А. Артемкина, С.А. Черноус// Фотохимические процессы в растениях на Севере и окружающая среда. Вестник МГТУ, Т. 12, №1, 2009. С. 137-142
3. В.И. Гольданский. Физическая химия позитрона и позитрония. М.: Наука, 1968.
4. В.И. Графутин, Е.П. Прокопьев. Применение позитронной аннигиляционной спектроскопии для изучения строения вещества. Успехи физических наук, 2002, т.172, с.67–83.
5. Р. С. Лаптев. Разработка метода аннигиляции позитронов для контроля дефектной структуры в системах металл-водород : диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук— Томск: 2014. — 129 с.

**ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОКОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ZrO_2 ,
АРМИРОВАННЫХ ОДНОСТЕННЫМИ УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ**

В.А. Цуканов, А.А. Леонов

Научный руководитель: профессор, д.т.н., О.Л. Хасанов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: vladimir.tsukanov95@gmail.com

**PHYSICAL AND MECHANICAL PROPERTIES OF ZrO_2 / SINGLE WALL CARBON NANOTUBES
NANOCOMPOSITES**

V.A. Tsukanov, A.A. Leonov

Scientific supervisor: Prof., Dr. O.L. Khasanov

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: vladimir.tsukanov95@gmail.com

***Abstract.** Zirconia ceramics reinforced with 0, 0.1, 0.5, and 1 wt.% single wall carbon nanotubes were fabricated by spark plasma sintering. The sintering was performed at 1500 °C with a dwell time of 10 min, with heating and cooling rates of 100 °C/min, and uniaxial pressure of 40 MPa was applied. Relative densities of the obtained pellets were calculated by weighing the pellets and measuring their dimensions. The highest value for microhardness was obtained for the pure ZrO_2 (14.72 GPa), and it decreased with the increase in the content of carbon nanotubes. On the other hand, fracture toughness of the obtained composites increased with the increase in carbon content. The highest value for fracture toughness was obtained for the composite with 1 wt.% of CNT (6.97 MPa·m^{1/2}).*

Введение. Научно-технический прогресс требует создания новых материалов с уникальными свойствами. Высокая термическая и химическая стойкость нанокерамики позволяют использовать ее в механизмах, работающих при экстремально высоких температурах, открывая новые перспективы для изготовления деталей ракетных двигателей, элементов и покрытий космических аппаратов, термоядерных двигателей, конструкций, работающих в агрессивных средах [1]. Тем не менее, нанокерамика обладает рядом недостатков, главными из которых принято считать хрупкость и низкая трещиностойкость. Это значительно ограничивает возможности ее использование в промышленных целях. Одним из методов улучшения прочностных характеристик керамических изделий является создание композиционных материалов, например с помощью армирования углеродными нанотрубками (УНТ) или волокнами. УНТ способны в несколько раз повысить показания трещиностойкости композита по сравнению с неармированной керамической матрицей. В последнее десятилетие написано множество работ, описывающих керамические наноконкомпозиты с добавлением одностенных и многостенных углеродных нанотрубок. Авторами работ исследовались механические и электрические характеристики композитов, полученных различными методами. Многообразие используемых методов изготовления наноконкомпозитов приводит к неоднозначным результатам. Некоторые авторы показали, что добавление УНТ приводит к увеличению трещиностойкости [2, 3]. Авторы работы [4] получили уменьшение

трещиностойкости ZrO_2 при добавлении УНТ. Целью данной работы является исследование влияния относительного содержания одностенных УНТ на механические свойства композитов на основе ZrO_2 , полученных методом SPS.

Материалы и методы исследования. Для приготовления композитов использовался порошок ZrO_2 , частично стабилизированный оксидом иттрия, 3 мол.% (Tosoh, Япония), и одностенные УНТ Tuball (0,1; 0,5 и 1 масс.%) (OCSiAl, Новосибирск, Россия). Проводилось диспергирование суспензии УНТ в этиловом спирте с помощью ультразвука в течение 30 минут, затем добавлялся порошок ZrO_2 , и полученная суспензия обрабатывалась еще в течение 30 минут в ультразвуковой ванне. После ультразвуковой обработки суспензия перемешивалась в магнитной мешалке в течение 30 минут, а затем сушилась в течение 3 часов. Полученные композитные порошки спекали методом искрового плазменного спекания (SPS) при температуре 1500 °С с временем выдержки 10 минут при скорости нагрева 100 °С/мин и одноосном давлении 40 МПа.

Полученные образцы обрабатывались на шлифовальном станке EcoMet™ 300 Pro (Buehler). Были рассчитаны теоретические плотности образцов с учетом плотности исходного порошка ZrO_2 и плотности УНТ. Затем измерялись геометрические размеры таблеток, взвешивались и получали экспериментальные значения образцов. Используя теоретические и экспериментальные значения, рассчитывались относительные плотности образцов. Микротвердость измеряли с помощью микротвердомера ПМТ-3М (ЛОМО, Россия) методом Виккерса при нагрузке 500 г. Трещиностойкость определяли на твердомере ТП-7Р-1 при нагрузке 5 кг и оценивали по методу Niihara [5]. Для анализа микроструктуры образцов использовались сканирующая электронная микроскопия (СЭМ, JSM 7500FA, JEOL, Япония).

Результаты. На рисунке 1 приведены изображения, полученные с помощью СЭМ для образцов с разным содержанием УНТ.

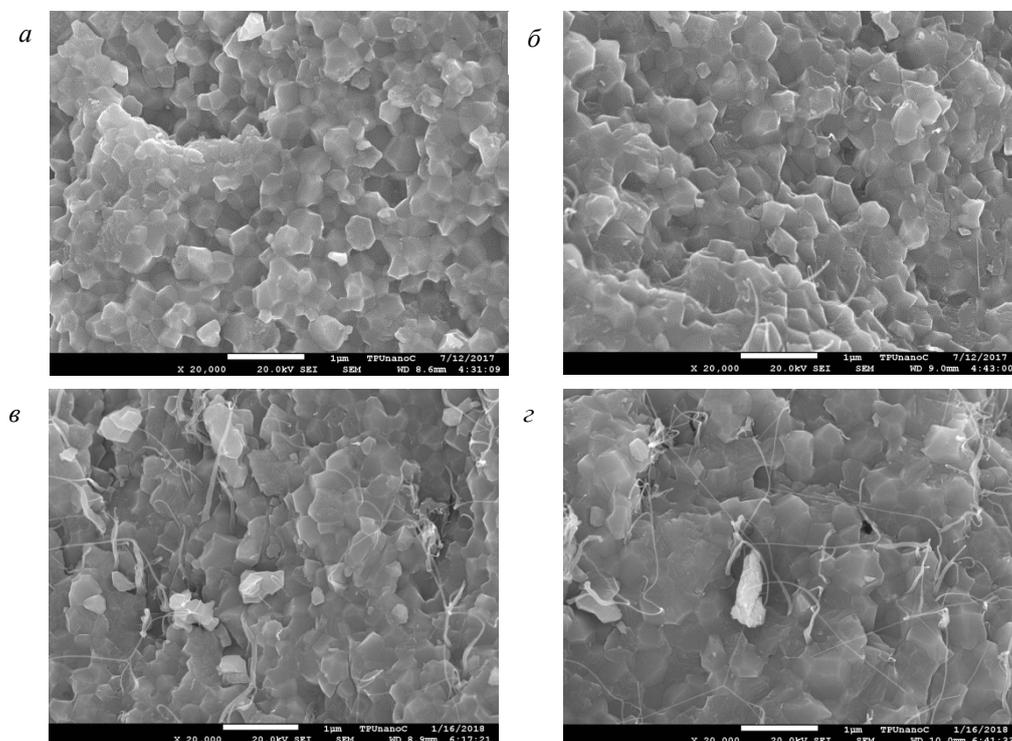


Рис.1. Изображения СЭМ образцов с разным содержанием УНТ: а) 0; б) 0,1 масс.%; в) 0,5 масс.%; г) 1 масс.%

Из рисунков *1в* и *1г* видно, что УНТ в виде длинных изгибающихся нитей довольно равномерно распределились на границах зерен при содержании УНТ 0,5 и 1 масс.%.
В таблице 1 приведены значения относительной плотности, а также микротвердости полученных образцов. Для «чистого» ZrO₂ микротвердость составила 14,72 ГПа. Из таблицы видно, что при увеличении концентрации УНТ значения микротвердости уменьшаются, что может быть связано со слабой связью на границе между УНТ и матрицей ZrO₂. Полученные значения трещиностойкости увеличиваются при увеличении концентрации УНТ. Наибольшее значение трещиностойкости наблюдается при добавлении 1 масс.% УНТ (6,97 МПа·м^{1/2}). Относительная плотность образцов находится в пределах 98-99%. Как было показано другими авторами, увеличение концентрации УНТ замедляет уплотнение композита [1].

Таблица 1

Относительная плотность и микротвердость полученных образцов

	масс. %	$\rho_{\text{отн}}, \%$	$H_V, \text{ГПа}$	$K_{\text{IC}}, \text{МПа} \cdot \text{м}^{1/2}$
Чистый 3YS	0	99,30	14,72	5,84
0,1 SWCNT	0,1	98,97	13,97	6,18
0,5 SWCNT	0,5	99,51	13,60	6,75
1 SWCNT	1	98,73	11,95	6,97

Заключение. Были получены композиты на основе ZrO₂ с добавлением одностенных углеродных нанотрубок методом SPS. При увеличении концентрации УНТ значения микротвердости уменьшаются, а трещиностойкость увеличивается. При добавлении 1 масс.% УНТ трещиностойкость составила 6,97 МПа·м^{1/2}. Таким образом, добавление УНТ позволяет улучшить трещиностойкость композита на основе ZrO₂.

Авторы выражают благодарность Егорову Юрию Петровичу, к.т.н., заведующему лабораторией Механических испытаний и металлографического анализа материалов (ТПУ) за помощь в проведении исследований трещиностойкости образцов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ritchie R.O. The quest for stronger tougher materials // Science. – 2008. – Т. 320. – № 5875. – С. 448–452.
2. Wang J., Kou H.M., Liu X.J., Pan Y.B., Guo J.K.. Reinforcement of mullite matrix with multi-walled carbon nanotubes // Ceram. Int. – 2007. – Т. 33. – № 5. – С. 719–722.
3. Corral E.L., Cesarano J., Shyam A., Lara-Curzio E., Bell N., Stuecker J., et al. Engineered nanostructures for multifunctional single-walled carbon nanotube reinforced silicon nitride nanocomposites // J. Am. Ceram. Soc. – 2008. – Т.91. – № 10. – С. 3129–3137.
4. Kasperski A., Weibel A., Alkattan D., Estournès C., Laurent Ch., Peigney A.. Double-walled carbon nanotube/zirconia composites: Preparation by spark plasma sintering, electrical conductivity and mechanical properties // Ceram. Int. – 2015. – Т. 41. – № 10. – С. 13731–13738.
5. Niihara K. A fracture mechanics analysis of indentation-induced Palmqvist crack in ceramics // J. Mater. Sci. Lett. – 1983. – Т. 2. – С. 221–223.

ПРОНИКНОВЕНИЯ ВОДОРОДА В ТИТАН ИЗ СРЕД РАЗНОГО АГРЕГАТНОГО СОСТОЯНИЯ

ЧжанТяньюань, ЕрхатДуалетханов

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н, Н.Н. Никитенков
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: greatwizard@yeah.net

HYDROGEN PENETRATION INTO TITANIUM FROM ENVIRONMENT IN DIFFERENT STATES

Zhang Tianyuan, Erhat Dualetkhanov

Scientific adviser: Professor, Doctor of physical-mathematical sciences, N.N. Nikitenkov

National Research Tomsk Polytechnic University,

Russia, Tomsk, Lenin Avenue, 30, 634050

E-mail: greatwizard@yeah.net

***Abstract.** In this paper, the accumulation of hydrogen in titanium from media of different aggregate states is considered, since the accumulation of hydrogen in structural and functional materials, which ultimately can lead to the destruction of structures, essentially depends on the environments in which these structures operate. Obtained: electrolytic and plasma saturation is characterized by hydrogen entrapment by low-temperature traps with weak binding energy (point defects and their complexes, vacancies and their complexes, etc. The method of Siwerst is characterized by capture of high-temperature traps (microcracks of microcracks, intergranular boundaries, etc.).*

Введение. В данной работе рассматривается накопление водорода в титане из сред разного агрегатного состояния, поскольку накопление водорода в конструкционных и функциональных материалах, которое, в конечном счете, может приводить к разрушению конструкций, существенно зависит от того, в каких средах эти конструкции функционируют [1, 2].

Материалы и методы исследования. В качестве сред разного агрегатного состояния использовались жидкость (электролит), газ (водород повышенных давления и температуре) и плазма высокочастотного разряда (ВЧР).

Образцы титана, размером 20×5×1 мм вырезались из пластины титана ВТ-1 в состоянии поставки. Образцы шлифовались, полировались, обезжиривались ацетоном и промывались в деионизованной воде. После чего насыщались водородом 3-мя методами. Параметры насыщения каждым методом были следующие.

При электролитическом насыщении образцов титана в качестве электролита использовался 1М раствор H₂SO₄ на основе дистиллированной воды [3]. Насыщение проводилось в течении 120 мин. при плотности тока $J = 0,56 \text{ A / cm}^2$.

Параметры режима насыщения из газовой среды (методом Сиверста): температура образца $T = 400^\circ \text{ C}$, давление $P = 2 \text{ атм.}$, Время насыщения $t = 2 \text{ часа}$.

Параметры режима насыщения из плазмы: температура образца $T = 150^\circ \text{ C}$, давление в камере насыщения $P = 3 \cdot 10^{-1} \text{ торр}$, время насыщения $t = 80 \text{ мин}$.

Указанные режимы выбраны на более ранних стадиях работы, исходя из критерия различия интенсивностей ТСГВ не более, чем на порядок, при насыщении одних и тех образцов тремя рассматриваемыми методами.

Для исследований использованы методы термостимулированной десорбции (который, по известным причинам мы называем методом термостимулированного газовыделения) [4] и анализатор водорода RHEN602 [5].

Результаты и обсуждение. На рисунках 1–3 приведены спектры ТСГВ, полученные после насыщения образцов титана 3-мя методами с описанными параметрами.

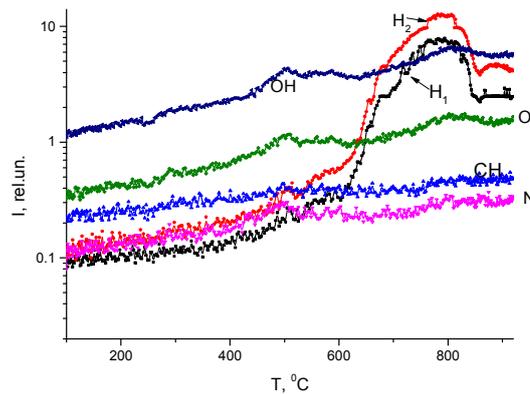


Рис.1. Спектры термостимулированного газовыделения (ТСВВ) изобразцов титана, насыщенного в электролите

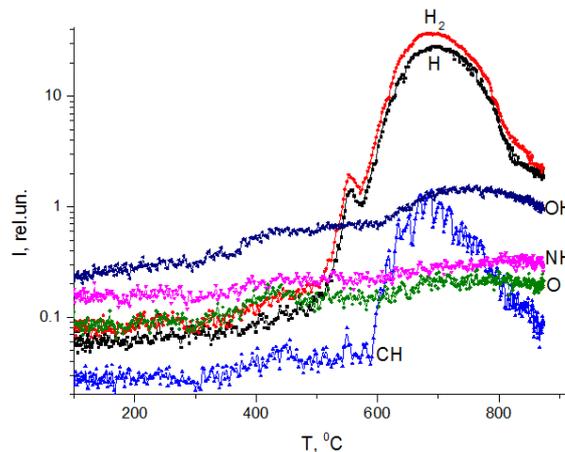


Рис. 2. Спектры термостимулированного выделения водорода (ТСВВ) из образцов титана, насыщенного методами Сиверст

Из сравнения рис. 1–3 видно, выходы водорода относительно выходов других газов, в том числе водород содержащих, существенно различаются в зависимости от метода (среды) из которых производилось насыщение образцов. Интегральные выходы, полученные интегрированием в программе ORIGIN 9. Pro представленных на рис. 1–3 зависимостей и сравнение их с содержанием водорода в образцах, полученного анализатором RHEN602 позволяет сделать следующие выводы (стр. 3).

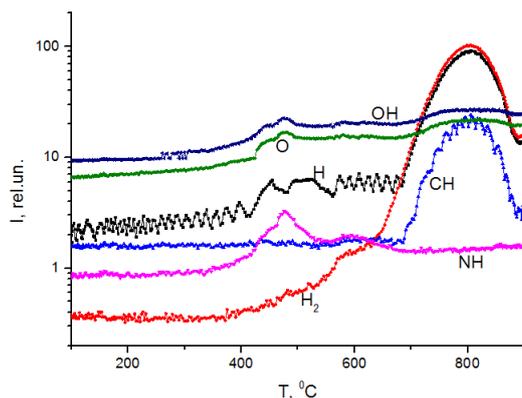


Рис. 3. ТСГВН₂, O и других водород содержащих молекул изобразцов титана, насыщенного в водородной плазме ВЧР

Выводы

1. Процесс накопления водорода в образцах титана существенно зависит от способа введения водорода и от среды, в которой осуществляется насыщение.
2. В спектрах ТСГВ наблюдается наименьшее из трех методов содержание водородсодержащих молекул CH, NH, и кислорода O, OH при насыщении методом Сиверста.
3. Ловушки водорода, создающиеся при насыщении из плазмы и электролита имеют одинаковую природу, отличающуюся от создающихся при насыщении методом Сиверста.
4. Для электролитического и плазменного насыщения характерен захват водорода низкотемпературными ловушками со слабой энергией связи (точечные дефекты и их комплексы, вакансии и их комплексы, дислокации и их различными модификациями, а также межзеренные границы и примесные атомы и др.).
5. Для метода Сиверста характерен захват на высокотемпературные ловушки (микропоры и микротрещины, межзеренные границы).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сыпченко В.С. Диссертация канд физ.-мат.-наук. 2015. -130 с.
2. Никитенков Н.Н., Хашхаш А.М., Сигфуссон Т.И., Кудрявцева Е.Н., Т.В. Смекалина, В.Д. Хоружий, В.С. Сыпченко, Тюрин Ю.И., Чернов И.П. Исследование особенностей поглощения водорода сталью 12Х12М1БФР при электролитическом, плазменном и высокотемпературном под давлением способах насыщения // Известия Томского политехнического университета. – 2011. – Т. 318. – № 2. – С. 97–100.
3. Никитенков Н.Н., Тюрин Ю.И., Чернов И.П. и др. Исследования накопления водорода в циркониевом сплаве методом термостимулированного газовыделения // Известия Томского политехнического университета. – 2006. – Т. 309. – № 4. – С. 52–55.
4. Вудраф Д., Делчар Т. Современные методы исследования поверхности. М., Мир, 1989.
5. Определение общего и поверхностного водорода методом плавления в атмосфере инертного газа [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://ru.leco-europe.com/product/rhen602/>

**ИЗУЧЕНИЕ И МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ПРОЦЕССОВ ДИФФУЗИИ
ВОДОРОДА В ТИТАНЕ**

Чжан Хунжу

Научный руководитель: профессор Тюрин Ю.И.

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: zhanghongru1993@gmail.com

**STUDY AND SIMULATION OF NON-STATIONARY PROCESSES OF HYDROGEN DIFFUSION IN
TITANIUM**

Zhang Hongru

Scientific Supervisor: Prof. Tyurin Y.I.

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin Ave, 30, 634050

E-mail: zhanghongru1993@gmail.com

***Abstract.** The behavior of hydrogen in metals is becoming an increasingly multidisciplinary interdisciplinary problem at the intersection of physics and solid state chemistry. The expansion of the range of problems studied is due to the expanding use of metal-hydrogen systems: the accumulation of hydrogen in hydrides and its use as environmentally friendly fuels, the materials science aspects of the use of hydrogen in nuclear, thermonuclear and hydrogen energy, for purifying hydrogen and separating its isotopes. Since the interaction of hydrogen with a metal, including the diffusion of hydrogen, determines the physical and physicochemical properties of materials, it is important to study the kinetic processes in metal-hydrogen systems, including the solution of diffusion problems. In this case, we carried out an experimental study and simulation of the processes of hydrogen diffusion to vacuum from previously flattened hydrogen metal plates of different thicknesses under thermal heating, and compared the results of numerical and analytical modeling with experiment.*

Введение. Поведение водорода в металлах становится все более многоплановой междисциплинарной проблемой на стыке физики и химии твердого тела. Расширение круга изучаемых проблем обусловлено расширяющимся использованием систем металл-водород: накопление водорода в гидридах и его использование в качестве экологически чистого топлива, материаловедческие аспекты применения водорода в ядерной, термоядерной и водородной энергетике, для очистки водорода и разделения его изотопов. Поскольку взаимодействие водорода с металлом, в том числе диффузия водорода, определяет физические и физико-химические свойства материалов, то важно изучить кинетические процессы в системах металл-водород, включая решение диффузионных задач. В наших исследованиях основное внимание уделяется процессу термостимулированного газовыделения (ТСГВ) водорода из титанового сплава, мы провели экспериментальное исследование и моделирование процессов диффузионного выхода водорода в вакуум из предварительно насыщенных водородом плоских металлических образцов различной толщины при термическом нагреве, и сопоставление результатов численного и аналитического моделирования с экспериментом.

Экспериментальные данные. В рамках серии экспериментов использовался сплав Ti толщиной с 0,15 до 1,05 мм. Насыщение водородом образцов по методу Сиверта (из газовой атмосферы) осуществлялось на установке psi «Gas Reaction Controller» в условиях $P=2\text{атм}$; $t=60\text{мин}$; $T=600^\circ\text{C}$.

Для изучения процесса диффузии водорода в образце были выполнены эксперименты по термостимулированному газовойделению (ТСГВ) водорода из образцов в вакуум. Регистрация выхода водорода при ТСГВ осуществлялась квадрупольными масс-спектрометрами.

На рис. 1б представлены экспериментальные результаты и зависимость температуры T_{max} достижения максимума ТСГВ от толщины материала для первого и второго пиков.

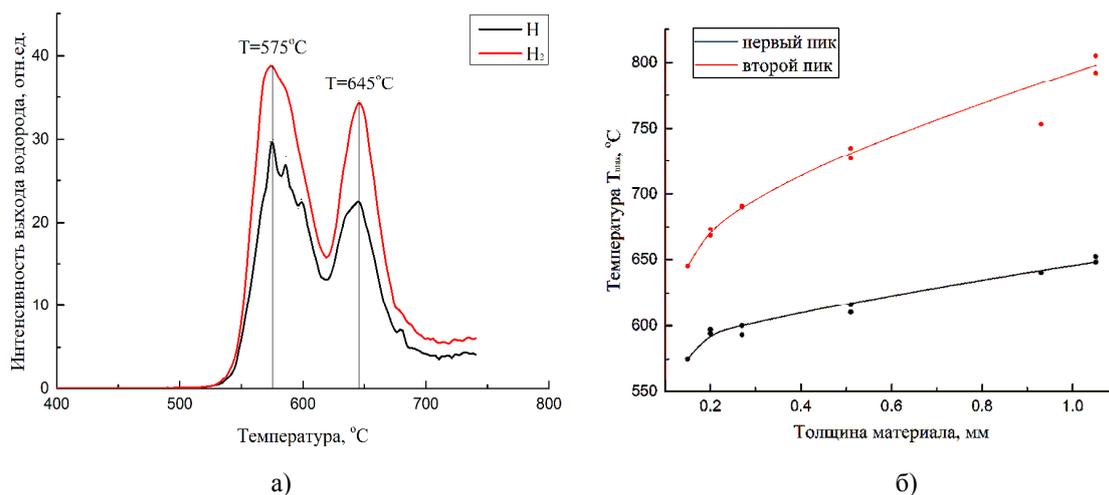


Рис. 1. А) Экспериментальные результаты по термостимулированному газовойделению из Ti при различной толщине образцов $d = 0,15\text{ мм}$; б) Зависимость температуры T_{max} достижения максимума ТСГВ от толщины образца титана (насыщение водородом методом Сиверта: $P=2\text{атм}$; $t=20\text{мин}$; $T=600^\circ\text{C}$)

Моделирование процессов термогазовыделения. Атомы водорода могут диффузионно выходить на поверхность со скоростью v_D . Атомы водорода рекомбинируют на поверхности в молекулы. Молекулы десорбируются с вероятностью $v'_{\text{д}}$. Стадийная модель такого процесса имеет вид [4-5]:

1. $(\text{H} - \text{L}) \xrightarrow{v_D} \text{H}_2$ - Диффузионный выход атома H на поверхность из невозбужденной связи;
2. $\text{H}_2 + \text{H}_2 \xrightarrow{k_1} (\text{H}_2)_2$ - Рекомбинация атомов на поверхности;
3. $(\text{H}_2)_2 \xrightarrow{v'_{\text{д}}} \text{H}_2 + \text{S}$ - Десорбция молекул.

Причиной появления второго максимума на кривой термогазовыделения из титана насыщенного водородом методом Сиверта, может служить разложение гидрида титана при температурах выше 600°C : $\text{TiH}_2 \xrightarrow{k(t)} \text{Ti} + 2\text{H}$.

В этом случае концентрация атомов водорода определяется неоднородным уравнением диффузии: $\frac{\partial n(x,t)}{\partial x} - D(t) \frac{\partial^2 n(x,t)}{\partial x^2} = \psi(x,t)$.

На рис. 2 представлены экспериментальная (красная линия) и расчетная (черная линия) плотность потока газовойделения водорода из образца. Видно, что расчетные результаты адекватны экспериментальным данным.

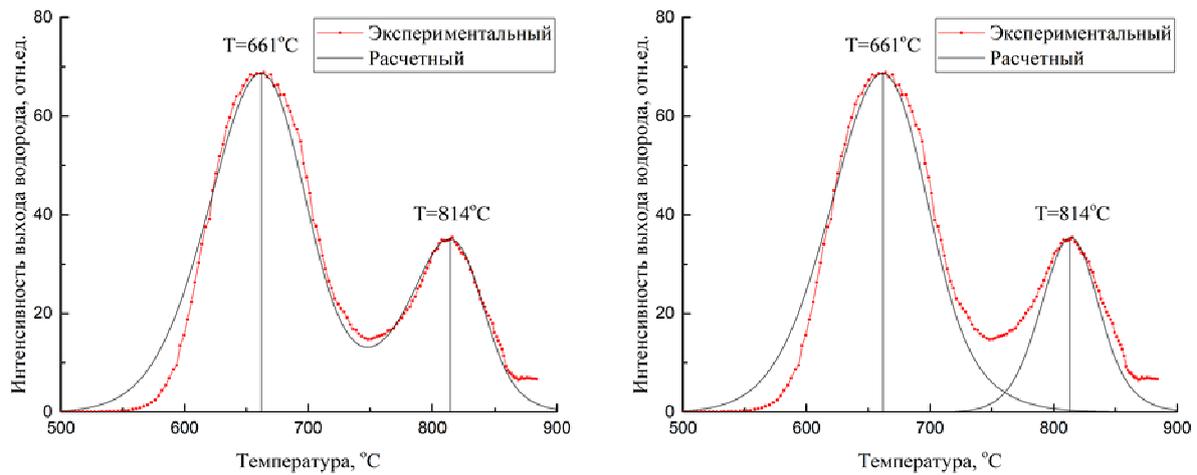


Рис. 2 Расчетные результаты по термостимулированному газовыделению из Ti при параметрах:

$$d=0,93\text{мм}, C=0,33\text{масс}\%, D_0=10^2\text{см}^2/\text{с}, E_0=0,49\text{эВ}, E_d=1,57\text{эВ}, E_a=3,08\text{эВ}$$

Выводы: Мы провели экспериментальное исследование и моделирование процессов диффузионного выхода водорода в вакуум из предварительно насыщенных водородом плоских металлических образцов различной толщины при термическом нагреве. Расчетные результаты хорошо соответствуют экспериментальным данным при $d = 0,15-1,05$ мм; пики газовыделения существенно сдвигаются в низкотемпературную область с уменьшением толщины пластины. Метод программируемого термогазовыделения водорода в условиях линейного нагрева металлов представляет удобный метод определения энергий активации, предэкспоненциальных множителей диффузионных, десорбционных и процессов разложения гидридов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Денисов Е А, Компаниец Т Н, Юхимчук А А, et al. Водород и гелий в никеле и стали 12X18H10T[J]. Журнал технической физики, 2013, 83(6);
2. Денисов Е А, Компаниец Т Н, Юхимчук А А, et al. Водород и гелий в никеле и стали 12X18H10T[J]. Журнал технической физики, 2013, 83(6);
3. Тюрин Ю. И., Чернов И. П. Аккумулирующие свойства водорода в твердом теле – ISBN 5–283–03186–1 –2000 –Р.213-234;
4. Тюрин Ю. И., Чернов И. П. Радиационно-стимулированный выход водорода из твердых тел – ISBN 5–98298–303–9 –2008 –Р. 206-218;
5. Самарский А. А. Теория разностных схем: учебное пособие. Москва: Наука Физико-математическая литра, –1989 –Р. 616 с.

**ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА КОЭФФИЦИЕНТОВ ЛИНЕЙНОГО ПРЕДСКАЗАНИЯ ДЛЯ
ОБРАБОТКИ ЭХО-СИГНАЛОВ УЛЬТРАЗВУКОВОГО НЕРАЗРУШАЮЩЕГО КОНТРОЛЯ**

Чжан Юймин

Научный руководитель: зав.лаб. ОЭФ ИЯТШ, к.т.н. Гаранин Г.В.

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: garaningv@tpu.ru**APPLICATION OF THE METHOD OF LINE PREDICTION COEFFICIENTS FOR ECHO-SIGNAL
PROCESSING FOR ULTRASONIC NON-DESTRUCTIVE TESTING**

Zhang Yuming

Scientific Supervisor: head. lab., k.t.n. Garanin G.V.

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: garaningv@tpu.ru

***Abstract.** At present, the method of linear prediction Coding coefficients is of great interest. Based on this model, systems for the analysis and synthesis of sound signals are built. The use of this model allows you to find differences and features when comparing audio signals. Its important advantage is the relative simplicity of parameter estimation using linear signal processing procedures. In this paper, we presented a method of linear prediction coefficients that allows us to analyze the ultrasonic signal from the point of view of its nonlinearity, which affects its time and frequency characteristics, in order to determine the dependence of the parameters of the method of linear prediction coefficients on the structural-phase state of the material under study - the titanium alloy VT6.*

Введение. В настоящее время, в области ультразвукового неразрушающего контроля, большой интерес вызывают различные методы обработки эхо-сигналов, позволяющие получать дополнительную информацию о состоянии материала объекта контроля. Одним из наиболее популярных в различных исследованиях является метод коэффициентов линейного предсказания или linear prediction coefficients (LPC). На основе данного метода часто строятся системы анализа и синтеза звуковых сигналов, применение данного метода позволяет находить отличия и особенности при сравнении звуковых сигналов. Важным достоинством метода LPC является относительная простота определения параметров исследуемых эхо-сигналов, для чего используются линейные процедуры обработки сигнала.

В данной работе представляется применение метода коэффициентов линейного предсказания, который позволяет проводить анализ ультразвукового сигнала с точки зрения оценки его нелинейности, влияющей на его временные и частотные характеристики, чтобы в дальнейшем определить зависимость параметров метода коэффициентов линейного предсказания от структурно-фазового состояния исследуемого материала – титанового сплава ВТ6.

Постановка эксперимента. Для сравнения возможностей различных алгоритмов обработки эхо-сигналов ультразвукового контроля, обработка результатов эксперимента была проведена несколькими методами в пакете программ MATLAB. Исходные данные для анализа эхо-сигналов были получены на

системе ультразвукового анализа твердого тела, исследовались отожженный образцы из титанового сплава ВТ6, диаметром 20 мм и толщиной 3 мм.

Основой временного метода (Time Of Flight – TOF) является измерение времени распространения ультразвукового сигнала при его взаимодействии с неоднородностями в материале. Это взаимодействие вызывает изменение времени распространения (пролета) волн в исследуемом объекте, для плоской пластины также этим методом можно определить скорость распространения продольной волны в материале:

$$V = \frac{T_{tof}}{2l} .$$

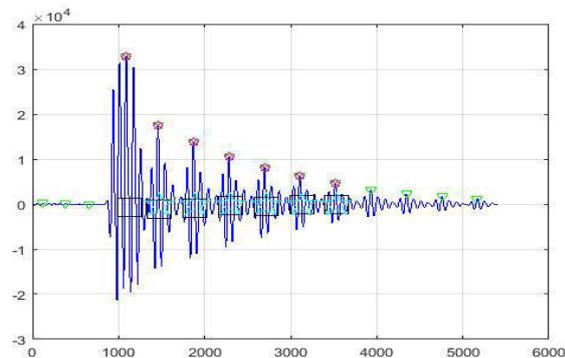


Рис. 1. Ультразвуковой сигнал в одной точке измерения, определение времени распространения и коэффициента затухания эхо-сигнала

Определение коэффициента затухания ультразвука (алгоритм DECAY) – по мере распространения ультразвуковой волны ее амплитуда, давление и интенсивность уменьшаются по закону экспоненты, что учитывается коэффициентом затухания α , который зависит от свойств среды распространения ультразвука, её физико-механических характеристик. Коэффициент затухания α , определяется соотношением для амплитуд двух соседних импульсов:

$$\alpha_t = -\frac{1}{t_n - t_{n-1}} \cdot \ln \left(\frac{A_n}{A_{n-1}} \right).$$

соотношением для амплитуд двух соседних импульсов:

В методе коэффициентов линейного предсказания (LPC) для сигналов ультразвукового контроля реализуются алгоритмы линейного предсказания, с помощью которых при анализе эхо-сигнала определяются коэффициенты предсказания $\{A_i\}$, и среднеквадратичная ошибка предсказания сигнала. Для анализа эхо-сигнала методом LPC необходимо задать порядок полинома предсказания и временной интервал анализа сигнала.

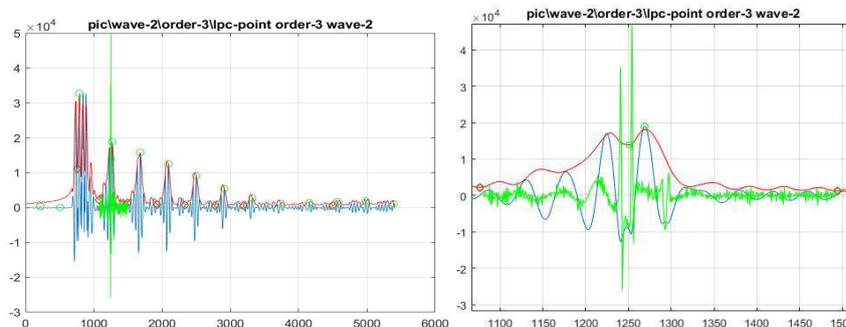


Рис. 2. Ультразвуковой сигнал в одной точке измерения, определение методом LPC ошибки предсказания ультразвукового сигнала

Результаты эксперимента представлены на рис. 3., здесь показаны определяемые методами TOF и DECAУ параметры ультразвукового сигнала для исследуемого образца. На левом графике показано время пробега сигнала в образце, пропорциональное скорости, на правом графике представлены значения коэффициента затухания, полученные при измерении параметров распространения ультразвука в множестве точек образца, при сканировании по сетке с шагом 0,5 мм.

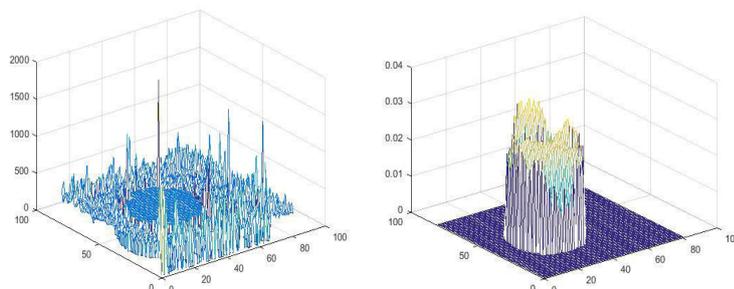


Рис. 3. Определяемые параметры ультразвукового сигнала при сканировании всего образца: время пробега, коэффициент затухания ультразвука

На рис. 4. а) показана значение среднеквадратичной ошибки предсказания. На рис. 1. б) и в) представлены значения коэффициентов предсказания $\{A_i\}$.

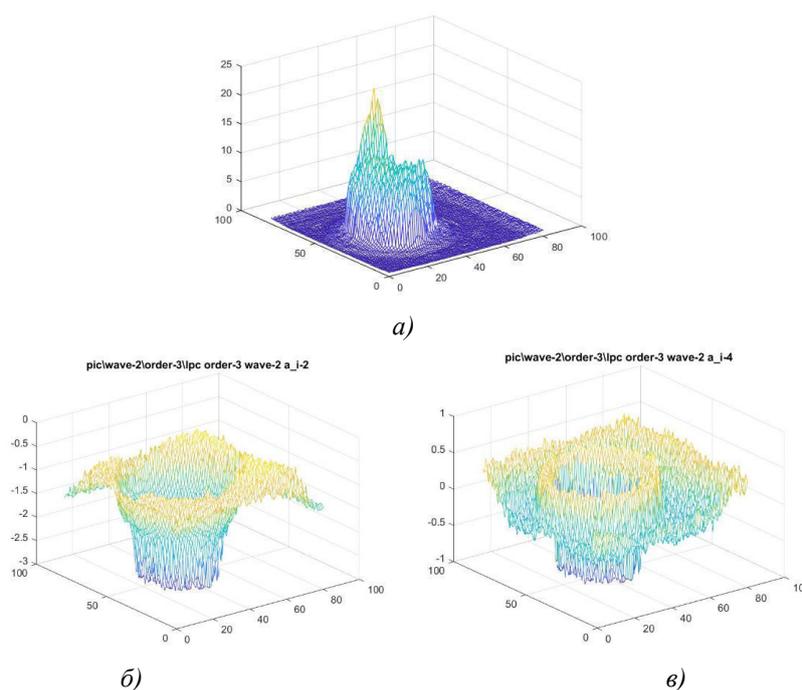


Рис. 4. Определяемые методом LPC параметры ультразвукового сигнала: а) – значение среднеквадратичной ошибки предсказания; б) и в) – значения коэффициентов предсказания $\{A_i\}$

Применение метода коэффициентов линейного предсказания (LPC) для анализа ультразвукового сигнала позволяет получать изображение контролируемого объекта в координатах параметров метода LPC, что дает дополнительные количественные данные, которые можно использовать как интегральную оценку, и облегчает задачу сравнения нелинейности, временных и амплитудных характеристик эхо-сигналов, полученных в различных точках объекта.

**АНАЛИЗ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА ВЫСОКОГО
РАЗРЕШЕНИЯ В ПОЛОСЕ ν_2 ДИОКСИДА СЕРЫ**

Чжоу Синьтун

Научный руководитель: ассистент А.Г. Зяткова

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: 354770247@qq.com

**ANALYSIS OF THE RO-VIBRATIONAL VERTICAL SPECTRUM OF HIGH RESOLUTION IN THE
BAND ν_2 OF SULFUR DIOXIDE**

Zhou Xintong

Scientific Supervisor: lecturer A.G. Ziatkova

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: 354770247@qq.com

Abstract. *Present work is a continuation of our extensive high resolution study sulfur dioxide. Ro-vibrational spectrum of the $^{32}\text{SO}_2$ molecule has been recorded in the region of $400\text{--}700\text{ cm}^{-1}$ where the hybrid ν_2 band is located. The Ground State Combination Differences method is used for the spectra assignment. The subsequent weighted fit of experimentally assigned transitions was made with the Watson Hamiltonian. A set of 33 parameters is obtained which reproduces the initial 500 infrared ro-vibrational energy values from more than 3000 experimental lines with a root mean square deviation $d_{\text{rms}} = 1.5 \cdot 10^{-4}\text{ cm}^{-1}$. The obtained set of spectroscopic parameters allows us to reproduce experimental data with the mean accuracy, comparable with the experimental uncertainty in line position.*

Введение. Развитие современной колебательно-вращательной спектроскопии молекул даёт возможность более точно описывать информацию полученную из экспериментов и, путем интерпретации спектров, исследовать основные характеристики молекул, которые дают возможность для исследования различных эффектов внутримолекулярной природы. Благодаря интерпретации спектров можно определить систему уровней энергии молекулы и найти спектроскопические постоянные, структурные параметры и потенциальную функцию исследуемой молекулы. Изучение спектров молекулы $^{32}\text{SO}_2$ является актуальным и важным в планетологии, астронавтики, химии и спектроскопии.

Объектом исследования данной работы является колебательно-вращательный спектр высокого разрешения молекулы $^{32}\text{SO}_2$. Спектроскопическая информация применяется в физике, планетологии, атмосферной оптике и т.д. SO_2 имеет применение в кругах современной науки, как химия, астрофизика, лазерные технологии и др. Таким образом, диоксид серы, выбрасываемый в атмосферу в процессе извержения вулканов, потом превращается серную кислоту H_2SO_4 . Это, в свою очередь, влияет на химические процессы в атмосфере и климате. Также SO_2 является одним из основных звеньев атмосферного цикла Земли. Чтобы решать задачу дистанционного мониторинга и обнаружения диоксида серы, нужно иметь информацию о тонкой структуре спектров поглощения молекулы в различных областях электромагнитного диапазона, в частности, инфракрасной. Необходимость исследования

спектров этой молекулы, обуславливается, в том числе, тем, что для определения корректной потенциальной функции молекулы серы необходимо иметь информацию обо всех её изотопических модификациях, в том числе, $^{34}\text{SO}_2$, S^{18}O_2 и т.д.

Перечисленные выше моменты позволяют говорить о важности и актуальности анализа спектров высокого разрешения молекулы SO_2 и извлечения из них высокоточной количественной информации. В соответствии с вышесказанным, целью данной работы является получение параметров модели Гамильтониана, корректно описывающей колебательно-вращательное распределение энергетических уровней в полосе ν_2 диоксида серы.

Анализ спектра высокого разрешения полосы ν_2 молекулы диоксида серы. Молекула $^{32}\text{SO}_2$ принадлежит к группе симметрии C_{2v} и является молекулой типа асимметричного волчка и представлена её равновесная структура. Центр полосы спектров молекулы ν_2 является 517.8726 см^{-1} в диапазоне $400\text{--}700 \text{ см}^{-1}$. Правила отбора, соответствующие разрешенным переходам b-типов имеют вид $\Delta J = 0, \pm 1; \Delta K_a = \pm 1; \Delta K_c = \pm 1$ соответственно [1]. В исследование включены в решение обратной спектроскопической задачи и определение спектроскопических параметров указанной полосы. В результате, это позволило получить больше экспериментальной информации о полосе ν_2 .

Для решения задачи была выбран гамильтониан типа Уотсона для молекулы типа асимметричного волчка в A -редукции и I' -представлении [2]. Фрагмент использованного оператора диагонального блока имеет следующий вид:

$$H^{\nu\nu} = E^{\nu} + \left[A^{\nu} - \frac{1}{2}(B^{\nu} + C^{\nu}) \right] J_z^2 + \frac{1}{2}(B^{\nu} + C^{\nu}) J^2 + \frac{1}{2}(B^{\nu} + C^{\nu}) J_{xy}^2 - \Delta_K^{\nu} J_z^4 - \Delta_{JK}^{\nu} J_z^2 J^2 - \Delta_K^{\nu} J^4 - \delta_K^{\nu} [J_z^2, J_{xy}^2]_{+} - 2\delta_J^{\nu} J^2 J_{xy}^2 + \dots,$$

где $A^{\nu}, B^{\nu}, C^{\nu}, \Delta_K^{\nu}, \Delta_{JK}^{\nu}, \Delta_J^{\nu}$ - вращательные параметры и параметры центробежного искажения; E - центр полосы, оператор $J_{xy}^2 = J_x^2 - J_y^2$, $[A, B]_{+} = AB + BA$.

Экспериментальные детали. При анализе использовался спектр высокого разрешения, зарегистрированный с помощью Фурье спектрометра Bruker IFS 120HR в университете г. Брауншвейг (Германия). Эксперимент проводился при давлении 10 Па, инструментальное разрешение представлено $0,0025 \text{ см}^{-1}$, длине оптического пути представлена 4 м. После 695 сканирований и времени 32 ч получен спектр. Спектры были калиброваны с помощью линий газа N_2O .

В этом спектральном диапазоне локализована полоса ν_2 (в качестве иллюстрации на Рис. 1.1 показан спектр молекулы $^{32}\text{SO}_2$ в диапазоне $400\text{--}700 \text{ см}^{-1}$, а также фрагмент Q-ветви полосы ν_2 на Рис. 1.2). Анализ спектра был выполнен с помощью методом комбинационных разностей.

Результаты. Проведен анализ колебательно-вращательной структуры полосы ν_2 молекулы $^{32}\text{SO}_2$ на основе метода комбинационных разностей. В результате, достигли максимальных значений квантовых чисел $J = 50$ и $K_a = 18$. Около 500 экспериментальных значений колебательно-вращательных энергий полученный в эксперименте состояния ν_2 . Получены 33 параметра, воспроизводимые данное значение колебательно-вращательной энергии, определенные 3000 экспериментальных линий с среднеквадратичным отклонением $d_{\text{rms}} = 1,5 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$.

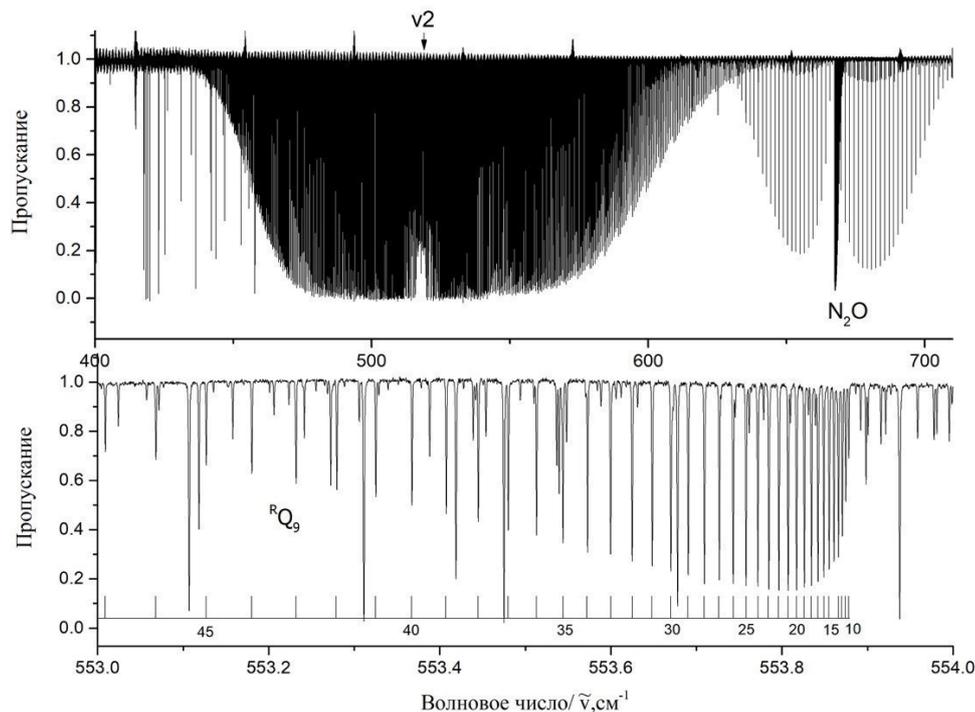


Рис. 1. Активная в инфракрасном поглощении колебательно-вращательная полоса молекулы $^{32}\text{SO}_2$ в области $400\text{-}700\text{ см}^{-1}$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. O.N. Ulenikov, E.S. Bekhtereva, O.V. Gromova, M. Quack, G. Ch. Mellau, C.Sydow, S.Bauerecker. T Extended analysis of the high resolution FTIR spectrum of $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$ in the region of the ν_2 band: Line positions, strengths, and pressure broadening widths//J.Mol. Spectrosc. – 2018. –V. 210. –P. 141-155
2. Макушкин Ю.С., Улеников О.Н., Чеглоков А.Е. Симметрия и ее применения к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул. – М. Издательство Томского Университета, 1990. – 224 с.

НАКОПЛЕНИЕ ВОДОРОДА В ТИТАНЕ ПРИ ЕГО ОБЛУЧЕНИИ НЕЙТРОНАМИ

Чжоу Хао, Сюй Шупэн

Научный руководитель: профессор В.В. Ларионов, профессор В.А. Варлачев

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: 326766782@qq.com

ACCUMULATION OF HYDROGEN IN TITANIUM UNDER IRRADIATION WITH NEUTRONS

Zhou Hao, Xu Shupeng

Scientific Supervisor: Prof., Dr. V.V. Larionov, Prof., Dr. V.A. Varlachev

Tomsk Polytechnic University, Russia, Lenin str., 30, 634050

E-mail: 326766782@qq.com

Abstract. *The course of the nuclear reaction in titanium under neutron irradiation with formation of hydrogen was experimentally confirmed. Additional hydrogen and gamma quanta with an energy of 889 and 1120 keV are observed. The gamma-field effect should be taken into account when creating neutron protection based on titanium borides. The irradiation of titanium leads to a change in the thermoelectric power to 20%.*

Введение. При проникновении в титан в процессах плавки, обработки и эксплуатации, водород оказывает как негативное влияние, например охрупчивание, так и положительное влияние, пластифицируя металл [1]. Водородное охрупчивание является проблемой для авиа- и ракетостроения, химической и нефтегазовой промышленности. Как известно гидриды титана и циркония с высоким содержанием водорода используются в контейнерах сухого хранения отработанного ядерного топлива. Отмечается, что использование водородсодержащих материалов в качестве защиты от нейтронов обусловлено высоким содержанием водорода в них. Отмечается и то обстоятельство, что в свободном состоянии сечение рассеяния тепловых нейтронов водородом составляет 38 барн, а в связанном состоянии в парафине – 80 барн. Однако эти материалы нельзя использовать при высоких температурах, которым присущи процессы в ядерных реакторах. Поэтому актуальной проблемой является создание гидридов металлов с повышенным содержанием водорода. С другой стороны высокое содержание водорода ведет к охрупчиванию и разрушению стенок контейнеров. Соотнесение защитных и прочностных характеристик материалов, исследование процессов получения материалов с указанными свойствами представляет дополнительную актуальную проблему. Для защиты получают гидриды с повышенным содержанием водорода до $(12 \div 15) \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$. Гидрид титана $\text{TiH}_{3,7}$ содержит Ti – 92.65%, H – 7.35 %, гидрид циркония ZrH_2 соответственно Zr – 97.33%, H – 2.67%. В США и Западной Европе распространенным является материал RX – 277 (плотность 1. 67 г/см³). Состав, % H – 3.37; В – 1.56; O – 58.85; Na – 0.59%; Mg – 0.3; Al – 23.91; Si – 2.13; S – 0.19; Fe – 0.19. Другой проблемой является использование соединений титана на основе бора для радиационной защиты (от нейтронов) [2].

Еще одна проблема состоит в том, что при введении водорода в титан существует предел насыщения. При обычном насыщении реакция идет по уравнению $\text{Ti} + \text{H}_2 = \text{TiH}_2$, где один атом титана присоединяет не 4 атомы водорода, а два, . т. е. TiH_2 , а не TiH_4 . Наш метод позволяет увеличивать

возможности водородного насыщения титана. Это вызвано тем, что наличие дефектов в металлах и сплавах оказывает влияние на параметры поглощения и распределения водорода в материалах. Целью работы является исследование реакции насыщения титана водородом под действием нейтронного облучения и применения термоэдс для контроля и анализа наводороживания титана в различных условиях.

Материалы и методы. Для исследования применяли образцы размером 20x20x1мм из титанового сплава ВТ1-0. Сплав имеет следующий состав [% wt.]: 0.18 Fe; 0.1 Si; 0.07 C; 0.12 O; 0.01 H; 0.04 N. Наводороживание осуществлялось по методу Сивертса [3]. После насыщения были проведены измерения концентрации водорода при помощи анализатора водорода RHEN602 фирмы LECO. Измерение величины термоэдс проводили на установке [3] с электродом из золота. Облучению резонансными нейтронами (энергия 0.1 МэВ) подвергли образцы титана, насыщенного до следующих концентраций: 1- СН=0,05%, 2- СН=0,06%, 3- СН=0,07%, 4 - СН=0,00%. Использовали канал ядерного реактора со следующими параметрами: Нейтронный поток $\Phi_n = 2 \times 10^{15}$ н/см²·с, где А – активность образца титана после облучения. При облучении титана резонансными нейтронами протекает реакция: $Ti_{22}^{46} + n_0^1 \rightarrow Sc_{21}^{46} + p_1^1 + \gamma$ (1). Период полураспада скандия равен 84 дня. Количество водорода в облученном образце титана после облучения может соответствовать содержанию изотопа Ti_{22}^{46} в естественном техническом титане. Протоны могут захватывать электрон и превращаться в водород $p_1^1 + e_1^0 \rightarrow H_0^1$ (2). Далее образуется молекулярный водород $H^1 + H^1 \rightarrow H_2$ (3). Образцы после облучения анализировали методом термоэдс. Гамма-спектр измеряли на гамма-спектрометре CANBERRA с ППД из сверхчистого германия. Объем детектора 42,6 кубических см. Энергетическое разрешение детектора равно 1,9 кэВ по гамма-линии с $E = 1,33$ МэВ.

Теоретическая часть. Зависимость термоэдс для металлов имеет довольно сложный характер. На её величину влияет облучение нейтронами в связи с тем, что происходит рассеяние на дополнительных атомах водорода, а также, возможно на эффективном поле гамма квантов. В общем случае её величина определяется формулой $E = \frac{\pi^2 k_B^2 T}{3|e|} \left[\frac{1}{N_d} \frac{\partial N_d}{\partial \varepsilon} - \frac{1}{F} \frac{\partial F}{\partial E} \right]_{\varepsilon=\varepsilon_F}$ (4), где k_B — постоянная Больцмана; T –

температура; e и ε – соответственно, заряд и энергия электрона; N_d — плотность электронных состояний в d-зоне; F – площадь поверхности Ферми; ε_F – энергия Ферми. Изменение термоэдс при внедрении водорода определяется изменением первого члена (4). Величина $dN_d/d\varepsilon$ зависит от плотности электронных состояний в d-зоне и с приближением уровня Ферми к верхней границе зоны становится отрицательной. Если проводимость определяется рассеянием на дефектах, то E_s равна (формула

Звягина): $E_s = \frac{k_B}{e} k_B (T_0 T)^{1/2} \frac{\partial(\ln g(E_F))}{\partial E}$ (5), где $g(E_F)$ - плотность состояний на уровне Ферми.

Поэтому анализ проводят путем построения зависимостей $E(T/2)$ и $E(1/T)$. Температуры, при которых происходит отклонение от основной зависимости изменяются в пределах от 300 К до 360 К. При повышении T величина термоэдс асимптотически зависит от температуры [3]:

$$E(T)_k = \frac{\pi^2 k_B}{3e} k_B T \frac{\partial(\ln g(E_F))}{\partial E} \rightarrow (6).$$

Экспериментальная часть. Измерение термоэдс образцов титана. В табл.1 приведены результаты измерения термоэдс титана ВТ1-0 до и после облучения нейтронами.

Таблица 1

Изотерма (334 К) термоэдс наводороженного титана ВТ1-0 до и после облучения нейтронами

w_t (mass. %)	0.042	0.05	0.06	0.07	0.365
мВ (до)	0.315	0.176	0.123	0.123	0.346
мВ (после)	0.382	0.190	0.144	0.163	–

В гамма-спектре наводороженного и облученного образца наблюдается две линии. Гамма-спектр образца с содержанием водорода 0.05% имеет следующие характеристики. Время измерения гамма-спектра 300 секунд. Площадь пика Sc^{46} с энергией 889 кэВ равна $1,95 \cdot 10^4$, а с энергией 1120 кэВ – $1,55 \cdot 10^4$.

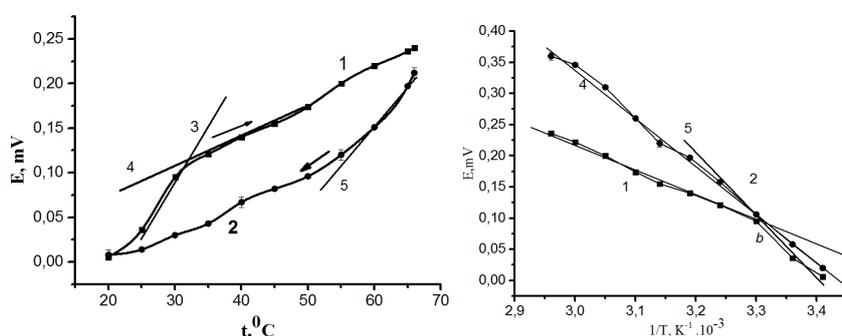


Рис. 1. Зависимость величины термоэдс от температуры (1- нагревание, 2 – охлаждение, 3, 4 касательные к кривой 1, 5 – касательная к кривой 2) и Зависимость величины термоэдс от $1/T$ (1 - концентрация водорода CH – 0.07%, 2 – 0.7%, 3, 5 – касательные к кривой 1; 4 – касательная к кривой 2, b – точка перегиба кривой 1)

Наблюдали изменение площади петли гистерезиса до и после облучения образца нейтронами. Это изменение пропорционально концентрации водорода.

Выводы. Экспериментально подтверждено протекание ядерной реакции в титане при облучении нейтронами с образованием водорода. Наблюдаются гамма-кванты с энергией 889 и 1120 кэВ. Эффект гамма-поля необходимо учитывать при создании нейтронной защиты на основе боридов титана. Наводороживание титана с последующим облучением приводит к изменению величины термоэдс до 20%, что может быть использовано для оперативного неразрушающего контроля материалов атомной энергетики.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гаранин Г.В., Ларионов В.В., Слярова Е.А. Диффузия водорода в металлах под действием ионизирующего и акустического излучения. Депонированная рукопись № 66-В2010 15.02.2010.
2. Важенин А.В. Радиационная онкология. Организация, тактика, пути развития. М.: Изд-во РАН, 2003. 236 с.
3. Патент Украины № 25785. Морозов И., Скороход В. Способ насыщения материалов газами. Бюлл. 3 13. 2007.

**ИССЛЕДОВАНИЕ НЕОДНОРОДНО НАВОДОРОЖЕННОГО ТИТАНА VT1-0 МЕТОДОМ
ИЗМЕРЕНИЯ ТЕРМОЭДС**

Чжу Ибо, Сюй Шупэн

Научный руководитель: профессор В.В. Ларионов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: 1456117095@qq.com

**THE STUDY OF HETEROGENEITY OF HYDROGENATED TITANIUM VT1-0 METHOD OF
MEASURING THERMO-EFM**

Zhu Ibo, Xu Shupeng

Scientific Supervisor: Prof., Dr. V.V. Larionov

Tomsk Polytechnic University, Russia, Lenin str., 30, 634050

E-mail: 1456117095@qq.com

***Abstract.** A method for the determination of the hydrogen concentration in titanium, using thermal force electromotive is proposed. The procedure for using a standard sample and a measuring system for specific technical situations are described. The measurements of the thermal electromotive force for these samples saturated with a different amount of hydrogen. Для увеличения неоднородности концентрации водорода использован метод напыления пленкой TiN, толщиной от 1 до 2.6 мкм.*

Введение. В предыдущей работе [1] было показано, что миграцию водорода в титане можно описать классическим уравнением диффузии при измерении вихревых токов и методом термоэдс. Однако этот метод не приспособлен для технологического контроля. Альтернативным методом анализа является метод измерения термоэдс. Для создания резко неоднородного распределения водорода в титане наводороживание осуществляли из газовой фазы. С этой целью использован метод предварительного нанесения покрытия пленкой TiN на пластину. Это позволяет получить существенный градиент концентрации водорода в материале. Исследование чувствительности данного метода при его относительной простоте представляет актуальную задачу. Целью данной работы является разработка исследование процессов миграции водорода в титане методом измерения термоэдс в условиях значительного градиента концентрации водорода

Материалы и методы. Материалом для исследования служил сплав титана VT1-0. Сплав изначально содержал следующие компоненты [% wt.]: 0.18 Fe; 0.1 Si; 0.07 C; 0.12 O; 0.01 H; 0.04 N. Наводороживание осуществлялось по методу Сивертса после напыления покрытием пленкой TiN. Большой интерес к пленкам TiN вызван сочетанием их свойств: твердость и упругость, температуростойкость, электро- и теплопроводность [2]. Для осаждения тонких пленок TiN (1 нм - 1 мкм) использован метод магнетронного распыления. Нитридные покрытия имеют показатели по электропроводности в интервале (0,15-0,23 мОсм). После насыщения были проведены измерения концентрации водорода при помощи анализатора водорода RHEN602 фирмы LECO. Послойное измерение содержания водорода проведено на магнитном спектральном анализаторе (MCA) по методу [3]. Сопротивления образцов титана на постоянном токе измерены с использованием комплекса

«KEINLEY INSTRUMENTS». Измерение величины термоэдс проводили на установке [4] с электродом из золота. Для калибровки установки изучена температурная зависимость термоэдс Cu (1,8 мкВ/К), Pt (-5,3 мкВ/К) относительно Ag (термоэдс 1,5 мкВ/К). Образцы представляли собой пластинки толщиной 1,0 мм и площадью 400 мм². Полученные значения термоэдс совпадают с известными данными с погрешностью не превышающей 6 %.

Результаты. Дискуссия. Пластины из титанового сплава длиной 10 см и шириной 2 см предварительно напыляли порошком TiN и наводороживали в течение 6 часов по методу Сивертса. После этого измеряли величину напряжения вихревого тока измерительной катушки на частотах в диапазоне 10-500 кГц и величину термоэдс как во времени, так и по координате пластины [1,4]. Температуру зонда изменяли в пределах от 20 до 70 °С. Результаты представлены графически на рисунках 1- 4 для изотермы 50 °С. Известно, что при наличии градиента концентрации водорода на образце может наблюдаться так называемая диффузионная термоэдс, пропорциональная именно этому градиенту. Ее величина может быть определена по уравнению: $\Delta\varphi = -\rho Z^* e D \Delta N_H$ (1), где D - коэффициент диффузии водорода в металле, Z - эффективный заряд атомов водорода, e - заряд электрона, $\Delta\varphi$ - разность потенциалов, ρ - удельное электросопротивление, ΔN_H - перепад концентрации атомов водорода между точками измерения эдс. Из уравнения (1) следует, что зависимость диффузионной термоэдс должна в основном определяться зависимостью от концентрации водорода в материале. Величина максимума термоэдс уменьшается (например, на рис 1 видно, что максимум сместился в смежную область с координатой 4 см от начального состояния). В то же время водород частично мигрировал за указанное время до точки с координатой 6 см ($E = 0.13$ мВ). Одновременно величину термоэдс измеряли для обратной стороны пластины. Это позволяет контролировать миграцию водорода по двум координатам одновременно.

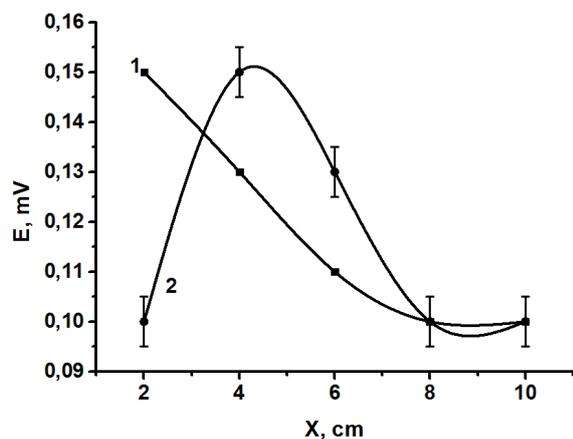


Рис. 1. Зависимость величины термоэдс от координаты зонда по длине титановой пластины (1- начальное значение термоэдс наводороженной пластины, 2 – через 144 часа)

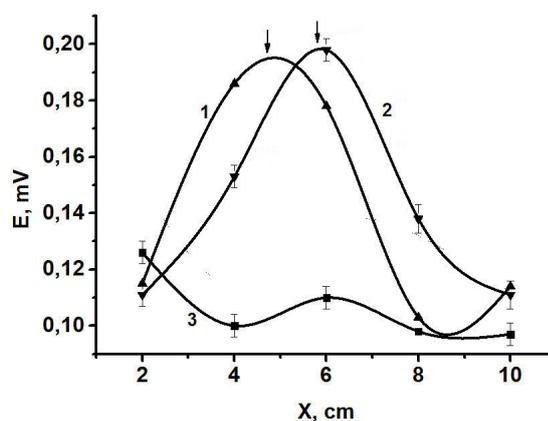


Рис. 2. Профиль изменения термоэдс от времени и координаты зонда на пластине (1, 2 – $t = 50$ °С, наводороженная сторона пластины (время анализа $\Delta t = 480$ часов, стрелками показано смещение по координате пластины). Кривая 3 приведена для обратной стороны пластины $t = 480$ час.

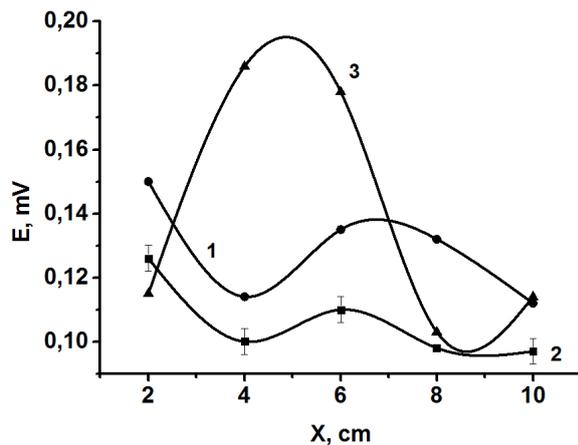


Рис. 3. Изменение профиля зависимости величины термоэдс от времени и координаты положения зонда на наводороженной пластине (1 – $t = 50$ °С, 2 – $t = 60$ °С, 3 – $t = 50$ °С – наводороженная сторона пластины (время анализа через 240 часов)). Кривые 1 и 2 для обратной (не токовой части) стороны титановой пластины

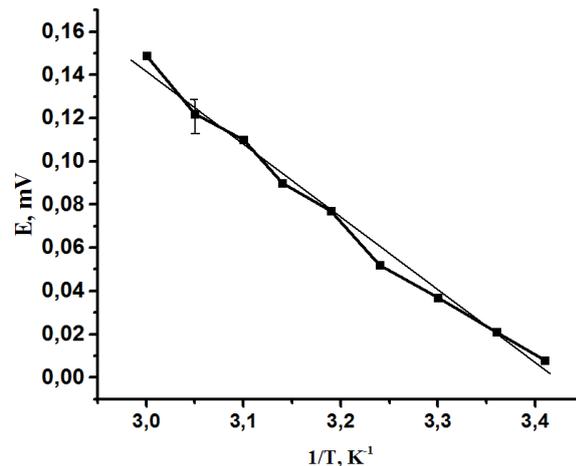


Рис. 4 (справа). Зависимость термоэдс от $1/T$ для координаты $x = 2$ см

Заключение. Исследован процесс миграции водорода в титановом сплаве методом измерения термоэдс. Значения термоэдс лежат в интервале от 0.008 мВ до 0.300 мВ при погрешности измерения ± 0.005 мВ. Показано, что по величине профиля изменения термоэдс по координате и во времени можно судить о миграционных процессах водорода в титановых сплавах. Ширина профиля изменения термоэдс зависит от температуры. Поэтому комплекс изотерм существенно расширяет информационную базу метода. Метод может быть легко распространен на другие металлы при наличии номограмм.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Чжу Ибо, Сюй Шупэн, Ларионов В.В. Исследование диффузии водорода в титане VT1-0 вихревыми токами // В сборнике: Перспективы развития фундаментальных наук. Сборник научных трудов XIII Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых: в 7 томах. – 2016. – С. 271–273.
2. Юрьев, Ю. Н., Михневич, К. С., Кривоногов, В. П., Сиделёв, Д. В., Киселева, Д. В., Новиков, В. А. Свойства пленок нитрида титана, полученных методом магнетронного распыления. Известия Самарского научного центра Российской академии наук, 16, №4(3), 2014. – С. 672–676.
3. Tyurin, Y.I., Larionov, V.V., Nikitenkov, N.N. A laboratory device for measuring the diffusion coefficient of hydrogen in metals during their simultaneous hydrogenation and electron irradiation // Instruments and Experimental Techniques, 2016, 59 (5), pp. 772-774.
4. Lider, A., Larionov, V., Kroening, M., Kudiiarov, V. Thermo-Electromotive Force and Electrical Resistivity of Hydrogenated VT1-0 Titanium Alloy 2016 IOP Conference Series: Materials 012004.

**СПЕКТР ВИРТУАЛЬНЫХ ФОТОНОВ В РЕАКЦИИ ЭЛЕКТРОРОЖДЕНИЯ
ПИОНОВ НА ДЕЙТРОНЕ**

К.А. Шарко, В.В. Гаузштейн, А.Ю. Логинов

Научный руководитель: д.ф-м.н. А.Ю. Трифонов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: gauzshtein@tpu.ru

**THE SPECTRUM OF VIRTUAL PHOTONS IN THE ELECTROPRODUCTION
OF PIONS ON A DEUTERON**

K.S. Sharko, V.V. Gauzshtein, A.Yu. Loginov

Scientific Supervisor: Prof., Dr. A.Yu. Trifonov

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: gauzshtein@tpu.ru

***Abstract.** Numerical and analytical calculations of the virtual photon spectrum have been performed for the electroproduction of pions on a deuteron. The numerical calculations of the virtual photon spectrum were performed without recourse to any approximations while a number of approximations were admitted in the derivation of the analytical expression. A comparison of the results of an exact numerical calculation of the virtual photon spectrum with the results of a calculation obtained using an approximate analytical expression for the virtual photon spectrum has been performed. It is shown that the discrepancy between the virtual photon spectra obtained with the help of numerical and analytical methods can reach 10% in the kinematic region of photoproduction of pions with intermediate energies.*

Введение. Процессы взаимодействия фотонов с нуклонами и ядрами имеют фундаментальное значение в физике элементарных частиц, ядерной физике и космологии. Среди них можно выделить фоторасщепление дейтрона и фоторождение пионов на нуклонах и легких ядрах. Ввиду своей значимости эти процессы являются предметом интенсивных экспериментальных и теоретических исследований. Однако при экспериментальных исследованиях этих процессов на электронных ускорителях возникает проблема, связанная с получением источника реальных фотонов. В данном случае пучок реальных фотонов может быть получен в процессе тормозного излучения релятивистских электронов при их рассеянии на ядрах мишени-конвертора. Очевидно, что при этом ускоритель не сможет работать в режиме накопителя, что приведет к существенному уменьшению числа зарегистрированных событий. Чтобы избежать этого и использовать преимущества метода внутренней мишени электронного накопителя, в экспериментах по фоторождению и фоторасщеплению используют квазиреальные виртуальные фотоны, возникающие при рассеянии релятивистских электронов на внутренней мишени накопителя под малыми углами. Концепция виртуальных фотонов (ВФ) широко используется в исследовании электромагнитных процессов [1-3]. Таким образом, информация о реакциях фоторождения и фоторасщепления извлекается из экспериментальных данных по реакциям электроорождения и электрорасщепления.

Спектр виртуальных фотонов. В данном докладе приведено сравнение приближенного аналитического спектра ВФ со спектром ВФ, полученным путем численного интегрирования точного аналитического выражения. В работе [4], в приближение нулевого угла рассеяния электрона, в лабораторной системе координат, было получено следующее соотношение между сечениями реакций электро- и фоторождения пиона на дейтроне:

$$\frac{d\sigma_e}{dE_1 dE_2 d\Omega_1 d\Omega_2} = \frac{N_e}{E_\gamma} \frac{d\sigma_\gamma}{dE_1 d\Omega_1 d\Omega_2} \left| \frac{E_\gamma + m_d - E_1 - \frac{E_2}{p_2} (E_\gamma \cos\theta_2 - p_1 \cos\theta_{12})}{D_0} \right|, \quad (1)$$

где

$$N_e(\omega) = \frac{\alpha}{\pi^2} \frac{E_\gamma^2 D_0}{\varepsilon_i} \int \frac{\varepsilon_f v_T}{D Q^4} d\Omega_e \quad (2)$$

спектр ВФ, $\vec{k}_i, \varepsilon_i, m_e$; $\vec{k}_f, \varepsilon_f, m_e$; \vec{p}_1, E_1, m_p ; \vec{p}_2, E_2, m_p - импульсы, энергии и массы электронов и протонов, \vec{p}_γ, E_γ - импульс и энергия фотона, m_d - масса дейтрона, $\omega = \varepsilon_f - \varepsilon_i$ - энергия виртуального фотона, $Q^2 = (\varepsilon_i - \varepsilon_f)^2 - (\vec{k}_i - \vec{k}_f)^2$ - квадрат 4-импульса виртуального фотона, $D(\theta_e, \varphi_e) = \varepsilon_i + m_d - E_1 - E_2 - \varepsilon_i \cos\theta_e + p_1 \cos\theta_{1e} + p_2 \cos\theta_{2e}$ - кинематический фактор, $D_0 = D(0,0)$, $v_T = -Q^2 / 2 + \vec{k}_i^2 \vec{k}_f^2 \sin^2 \theta_e / \vec{q}^2$ - лептонная структурная функция, соответствующая поперечным виртуальным фотонам. В выражении (2) энергия конечного электрона ε_f , как функция нуклонных переменных и углов вылета электрона θ_e и φ_e имеет вид:

$$\varepsilon_f = \frac{2\varepsilon_i (P_z - A) + A^2 - P^2 - m_\pi^2}{2(\varepsilon_i (1 - \cos\theta_e) - A + P \cos\theta_{pf})}, \quad (3)$$

где $A = E_1 + E_2 - m_d$, $\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2$, θ_{pf} - угол между импульсами \vec{P} и \vec{k}_f . Из выражения (2) следует, что при вычислении спектра ВФ для каждого конкретного $\omega = \varepsilon_f - \varepsilon_i$ необходимо выполнить сложное интегрирование по углам вылета θ_e и φ_e конечного электрона. Такое интегрирование можно выполнить лишь с помощью численных методов, что существенно замедляет скорость статистического моделирования реакции. В этой связи, используя ряд приближений, в работе [4] было получено приближенное аналитическое выражение спектра ВФ:

$$N_e = \frac{\alpha}{2\pi} \frac{\omega_0^2}{k_i^2} \frac{b}{b'} \frac{a_r + b_r}{a_r - a' b'^{-1} b_r} \left(\left(1 - \frac{2a}{\omega_0^2} \right) \ln \left(\frac{(a' - b')(a_r + b_r)}{(a + b)(a_r - b_r)} \right) - \frac{4b}{\omega_0^2} \right), \quad (4)$$

где $a = m_e^2 - \varepsilon_i \varepsilon_f(0^\circ)$, $b = k_i k_f(0^\circ)$, $\delta = (m_e^2 b_r / a_r) (1 - \varepsilon_f / \varepsilon_f(0^\circ))$, $\omega_0 = \varepsilon_i - \varepsilon_f(0^\circ)$, $a' = a - \delta$, $b' = b + \delta$, $a_r = \varepsilon_i - E_1 - E_2 + m_d$, $b_r = p_{1z} + p_{2z} - \varepsilon_i$.

Сравнение спектров виртуальных фотонов. Представление экспериментальных результатов основано на распределении событий по интервалам разбиения не более чем одной из шести кинематических переменных реакции $\gamma d \rightarrow p p \pi^-$ из-за недостаточной статистики. Величину энергии ВФ

определяем в приближении рассеяния электронов вперед по известным кинематическим характеристикам двух конечных нуклонов. Относительное число таких фотонов получается интегрированием выражения (2) по телесному углу Ω_e рассеянного электрона.

На рис. 1 представлены потоки ВФ, как функции протонных углов: сплошные линии отвечают полученному аналитическому выражению (4), точки – результату численного интегрирования формулы (2). Как видим, степень согласия этих вычислений зависит от области значений нуклонных углов и энергий. Из рис. 1 следует, что результаты аналитического выражения (15) могут отличаться от результатов численного интегрирования выражения (13) более чем на 10%. Это вносит определенные проблемы при применении аналитических спектров виртуальных фотонов для статистического моделирования реакции фоторождения пиона на дейтроне во всей кинематической области нашего эксперимента. Таким образом, из результатов данной работы следует, что при статистическом моделировании выходов реакции $\gamma d \rightarrow p p \pi^-$ следует использовать спектр ВФ, полученный путем численного интегрирования выражения (13). Это приведет к существенному увеличению времени, необходимого для статистического моделирования реакции. С другой стороны, асимметрии и поляризационные наблюдаемые, связанные с поляризацией дейтериевой мишени, слабо зависят от спектра ВФ, поскольку они находятся из отношений комбинаций выходов, в определение которых спектр ВФ входит как множитель. Поэтому при статистическом моделировании асимметрий реакций фоторождения пионов на дейтроне можно использовать приближенное аналитическое выражение спектра ВФ.

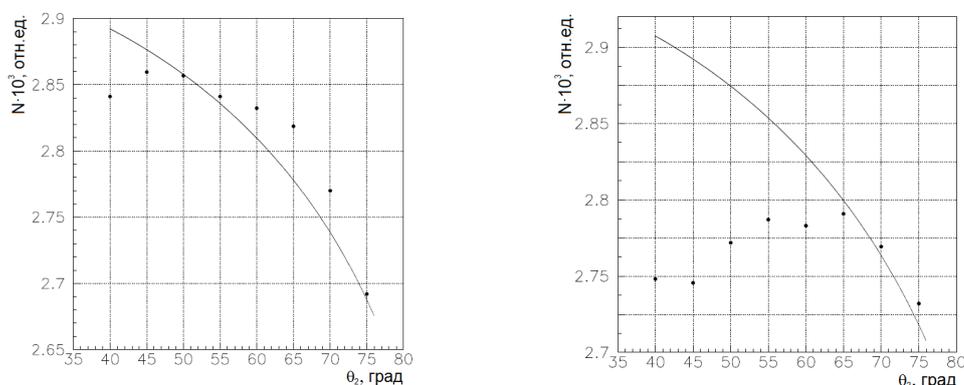


Рис 1. Относительное количество ВФ как функция полярного угла одного из протонов: линия соответствует аналитическому выражению (4), точки – результат численного интегрирования выражения (3). Левая панель соответствует значениям параметров $\theta_1=60^\circ$, $E_1=50$ МэВ, $E_2=100$ МэВ, правая панель соответствует значениям параметров $\theta_1=60^\circ$, $E_1=100$ МэВ, $E_2=100$ МэВ.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-32-00013.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Dalitz R.H. and Yennie D.R. // Phys. Rev. – 1957. – V.105. – P.1598.
2. Budnev V.H. et al. // Phys. Reports (Section C of Phys. Lett.) – 1975. – V.15. – N.4. – P.181.
3. Tiator L. et al. // Nucl. Phys. A. – 1982. – V.379. – P.407.
4. Gauzshtein V.V. et al. // Russian Physics Journal – 2017. – V.60. – P.1182.

**РОЛЬ МЕТОДА ЭЛЕКТРОФОРЕТИЧЕСКОГО ОСАЖДЕНИЯ В СОЗДАНИИ БИОКОМПОЗИТА
НА ОСНОВЕ СЛОЕВ ГИДРОКСИАПАТИТИ И НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА**

А.А. Шаронова

Научный руководитель: к.ф.-м.н. Р.А. Сурменев

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: rsurmenev@mail.ru

**THE ROLE OF ELECTROPHORETIC DEPOSITION METHOD IN THE CREATION
OF A BIOCOSPOSIT BASED ON HYDROXYAPATITE LAYERS AND SILVER NANOPARTICLES**

A.A. Sharonova

Scientific Supervisor: Dr. R.A. Surmenev

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: rsurmenev@mail.ru

***Abstract.** In this work, multifunctional three-layered biocomposite on the basis of hydroxyapatite coatings and silver nanoparticles has been fabricated through the use of nanofabrication techniques. Radio-frequency magnetron sputtering was used to prepare the first and third layers of hydroxyapatite coating on titanium and on silver nanoparticles, respectively. Electrophoretic deposition method was used to prepare the antibacterial layer of silver nanoparticles. Poly(vinylpyrrolidone) (PVP)-stabilized silver nanoparticles (AgNPs) had a spherical shape with a diameter of the metallic core of 70 ± 20 nm and ζ -potential -20 mV. The diffraction patterns of the biocomposites revealed the peaks of crystalline HA and metallic silver (Ag). XRD patterns revealed that the AgNPs are crystalline with the crystallite size of appr. 14 nm.*

Введение. В области современной дентальной имплантологии существует проблема формирования фиброзной капсулы вокруг имплантата, что в свою очередь неизбежно приводит к снижению эффективности лечения. Следовательно, одной из задач биомедицинского материаловедения является придание поверхности имплантатов, для медицинского применения, биосовместимых свойств [1]. В имплантации зубных единиц с целью достижения антибактериального эффекта, снижения риска формирования фиброзной капсулы и создания прочной связи имплантат-кость является перспективным использование Ag-ГА биоконпозита, на основе кальций-фосфатного покрытия, со структурой и фазовым составом соответствующего нестехиометрическому гидроксиапатиту (ГА), а также монослоем наночастиц (НЧ) серебра (Ag) [2, 3]. Перспективными подходами к созданию Ag-ГА биоконпозита являются метод ВЧ-магнетронного распыления, позволяющий одноэтапно, управляя режимами процесса, формировать покрытия с заранее заданными свойствами, отвечающими требованиям современной стоматологии [4]. Метод химического восстановления серебра позволяет синтезировать частицы с высокой концентрацией, контролировать как размер, так и форму наночастиц [5]. В свою очередь использование метода электрофоретического осаждения (ЭФО) приводит к качественному и равномерному формированию монослоя частиц на поверхности биопокровтий. Этот метод позволяет с высокой точностью контролировать количество осаждаемых частиц серебра на поверхности образца [6].

Экспериментальная часть. Формирование покрытий на основе ГА проводилось методом ВЧ-магнетронного распыления, как на титановой подложке, так и на поверхности слоя AgНЧ с различным временем напыления (180-480 мин). AgНЧ были синтезированы в водном растворе, стабилизированы с поливинилпирролидоном (PVP), имеют диаметр металлической оболочки 70 ± 20 нм и отрицательный заряд -20 мВ, подробная методика синтеза и описание AgНЧ представлена в работе [5]. Использование метода ЭФО для функционализации ГА покрытий открывает доступ к широкому спектру варьируемых параметров таких как: время осаждения; рабочее напряжение; концентрация рабочего раствора; электролит; расстояние между анодом и катодом. Возможность варьировать параметры процесса ЭФО, позволяет подобрать оптимальный режим для формирования монослоя AgНЧ на поверхности ГА покрытия, с наличием серебра необходимым для достижения антибактериального эффекта. Количество серебра, осажденное в процессе ЭФО, определялось методом атомно-адсорбционной спектроскопии, результаты исследования представлены на рисунке 1.

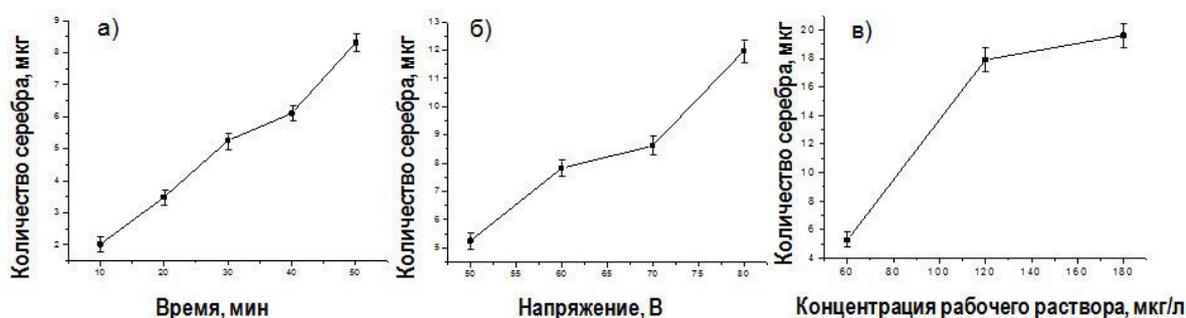


Рис. 1. Зависимость количества серебра на поверхности ГА покрытия, сформированного на титановой подложке в течение 480 мин, с толщиной 900 ± 100 нм, от: а) времени процесса осаждения - рабочее напряжение 50 В, расстояние между анодом и катодом $1,5 \pm 0,5$ мм, концентрации рабочего раствора 60 мг/л, б) рабочего напряжения - время осаждения 30 мин, расстояние между анодом и катодом $1,5 \pm 0,5$ мм, концентрации рабочего раствора 60 мг/л, в) концентрации рабочего раствора - время осаждения 30 мин, рабочее напряжение 50 В, расстояние между анодом и катодом $1,5 \pm 0,5$ мм

Результаты исследования. На рисунке 1 представлены графики зависимости количества серебра на поверхности ГА покрытия, сформированного на титановой подложке в течение 480 мин, с толщиной 900 ± 100 нм, от основных варьируемых параметров метода ЭФО, а именно: времени процесса осаждения, рабочего напряжения, концентрации рабочего раствора и расстояния между анодом и катодом. Сравнивая зависимость количества серебра от времени и рабочего напряжения, можно заметить, что значения в 8 мкг достигаются как за 50 минут при напряжении в 50 В, так и за 30 минут при напряжении в 70 В. Таким образом повышение рабочего напряжения приводит к сокращению времени процесса осаждения НЧ на поверхность ГА покрытия, следовательно представленный режим приводит к росту энерго- и ресурсоэффективности технологии создания Ag-ГА биокompозита. Увеличение концентрации рабочего раствора приводит к росту числа НЧ на поверхности ГА покрытия. Однако, изменение данного параметра со временем достигает предела, то есть раствор становится пересыщенным и дальнейшее увеличение концентрации AgНЧ не приведет к желаемому результату. Так же исследована зависимость количества осажденного серебра на поверхности ГА покрытия от расстояния между анодом и катодом,

время осаждения 30 мин, рабочее напряжение 50 В, концентрация рабочего раствора 60 мкг/л. Результаты атомно-адсорбционного анализа показали высокое содержание серебра на поверхности ГА покрытия при расстоянии между анодом и катодом в 1 мм, что составляет 5,714 мкг/см², в то время как для 3 мм это значение составляет 0,761 мкг/см². Таким образом, минимальное расстояние между анодом и катодом является наиболее эффективным для формирования монослоя наночастиц серебра на поверхности ГА покрытия. Финальным этапом формирования Ag-ГА биокompозита являлось напыление тонкого ГА покрытия на поверхности слоя AgНЧ, время напыления составляло 180 мин, толщина осажденного ГА покрытия 150±30 нм.

Заключение. В ходе выполнения данной работы методом ВЧ-магнетронного распыления мишени, приготовленной из механохимически синтезированного ГА, сформированы биосовместимые ГА покрытия. С целью формирования биокompозита с антибактериальными свойствами были синтезированы, методом химического восстановления, частицы серебра с размером 70±20 нм, зарядом - 20 мВ. Установлены зависимости основных электрофоретических параметров (время, напряжение, концентрация, расстояние от анода до катода) на количество серебра, осажденного на поверхности ГА покрытия. Также планируется дальнейшее исследование, созданного в работе Ag-ГА биокompозита, как *in-vitro* так и *in-vivo*, с целью изучения его антибактериальных и биологических свойств.

Работа выполнена при поддержке стипендии Президента Российской Федерации (СП-444.2016.4) и российского научного фонда (15-13-00043). Авторы выражают благодарность к.ф.-м.н. М. А. Сурмёновой, проф. М. Эппле, др. К. Лозе и др. О. Примаку (университет Дуйсбург-Эссен).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Эппле М. Биоматериалы и биоминерализация. – Томск: Ветер, 2007. – 144 с.
2. Hanawa T. (2010) Biofunctionalization of titanium for dental implant. Japanese Dental Science Review, vol. 46, no. 2, pp. 93–101.
3. Farooq I., Irman Z., Farooq U., Leghari A., & Ali U. (2012) Bioactive Glass: A Materials for the Future. World Journal of dentistry. no. 3, pp. 199–201.
4. Шаронова А.А., Сурмёнев Р.А., Сурмёнева М.А., Иванова А.А., Грубова И.Ю., Пичугин В.Ф., Эппле М., Примаку О. Особенности формирования структуры ВЧ-магнетронных покрытий на основе серебросодержащего гидроксиапатита // Известия вузов. Физика. - 2013 – Т. 56 – №. 12/2. – С. 240-245.
5. Sharonova A., Loza K., Surmeneva M., Surmenev R., Prymak O., & Epple M. (2016) Synthesis of positively and negatively charged silver nanoparticles and their deposition on the surface of titanium. IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, no. 116, p. 012009.
6. Boccaccini A R, Keim S, Ma R, Li Y, Zhitomirsky I 2010 Electrophoretic deposition of biomaterials J Royal Soc Interface 7 S581-S613 Название книги / Под ред. И.О. Фамилия. – М.: Издательство, 2011. – 123 с.

**СТЕРЕОТАКСИЧЕСКАЯ РАДИОТЕРАПИЯ ПРЕДСТАТЕЛЬНОЙ ЖЕЛЕЗЫ В РЕЖИМЕ
ГИПОФРАКЦИОНИРОВАНИЯ (SBRT\VMAT) В ТООД**Е.В. Шеффрес

Научный руководитель: старший преподаватель ИЯТШ, к.ф.-м.н. Е.С. Сухих

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: esheffres@yandex.ru**STEREOTAXIC RADIOTHERAPY OF THE PROSTATE CANCER IN THE HYPOFRACTION
MODE (SBRT \ VMAT) IN TOMSK REGIONAL ONCOLOGY CENTER**E.V.Sheffres

Scientific Supervisor: Ph.D. E.S. Sukhikh

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: esheffres@yandex.ru

***Abstract.** In the present study, we justified the use of the ArcCHECK diode array detector and 3DVH software for stereotaxic radiotherapy of the prostate cancer in Tomsk Regional Oncology Center.*

Введение. Для создания оптимального дозиметрического плана облучения, полностью удовлетворяющего международному предписанию к стереотаксической радиотерапии предстательной железы [1], необходимо иметь систему дозиметрического планирования с алгоритмом расчета дозы на основе метода Монте-Карло.

Материалы и методы исследования. В Томском областном онкологическом диспансере (ТООД) используется система дозиметрического планирования Мопасо (компания Elekta AB), для которой были созданы и верифицированы [2] модели фотонного пучка с энергией 6 и 10 МВ для ускорителя Elekta Synergy (компания Elekta AB). Благодаря комплексу системы Мопасо и высокотехнологичного электронного ускорителя Elekta Synergy стало возможно осуществлять стереотаксическое лечение для любой локализации тела пациента.

На рисунке 1 представлен дозиметрический план лечения, полностью удовлетворяющий международным требованиям по степени локального контроля опухоли и степени повреждения критических органов и нормальных тканей.

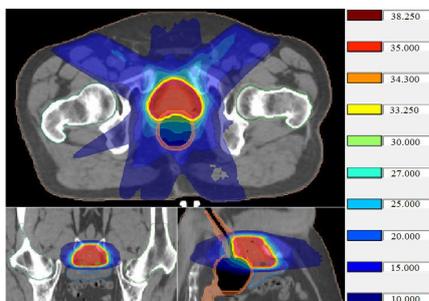


Рис. 1. Дозиметрический план лечения, созданный в системе Мопасо с использованием методики доставки дозы с высокой объемной модуляцией интенсивности излучения для предстательной железы в режиме гипофракционированного облучения

Однако нужно отметить, что распределение дозы в объеме мишени и критических органов пациента, которое продемонстрировано на рисунке 1, не является окончательно достоверным. Причина состоит в том, что система дозиметрического планирования использует модель фотонного пучка с определенным алгоритмом расчета, который имеет свои допустимые уровни неопределенности.

Чтобы убедиться в том, что дозиметрический план лечения на ускорителе будет соответствовать плану, представленному в системе планирования, его необходимо верифицировать на самом терапевтическом ускорителе. Для этого нужен дозиметрический фантом с высокой точностью измерения распределения дозы для реального лечебного плана и приближенный к форме тела пациента. Цилиндрический дозиметрический фантом ArcCHECK, который используется в ТООД с сентября 2017 года, подходит под эти критерии и имеет ряд преимуществ, таких как: 1) простота в установке (не более 5 минут), 2) отсутствие зависимости чувствительности детекторов от угла падения пучка излучения (не теряется информация о полном распределении), 3) высокое пространственное разрешение, что позволяет проводить верификацию маленьких полей с высоким градиентом дозы (размер диода $0,64\text{мм}^2$ в отличие от размера ионизационной камеры 3мм^2) и др.

Таким образом, при использовании в клинической практике VMAT (модуляция интенсивности излучения по объему мишени во время ротации терапевтической головки аппарата), только ArcCHECK позволит достоверно, без потери информации, показать реальную картину распределения дозы в пациенте с учетом всех особенностей терапевтического аппарата.

Для переноса реального рассчитанного дозиметрического плана на верифицирующий дозиметрический фантом, в систему Monaco была экспортирована модель цилиндрического фантома ArcCHECK с соответствующей электронной и физической плотностью для корректного расчета дозы.

На рисунке 2 представлено распределение реального дозиметрического плана без искажений в модели цилиндрического фантома ArcCHECK в системе Monaco (версия 5.1).

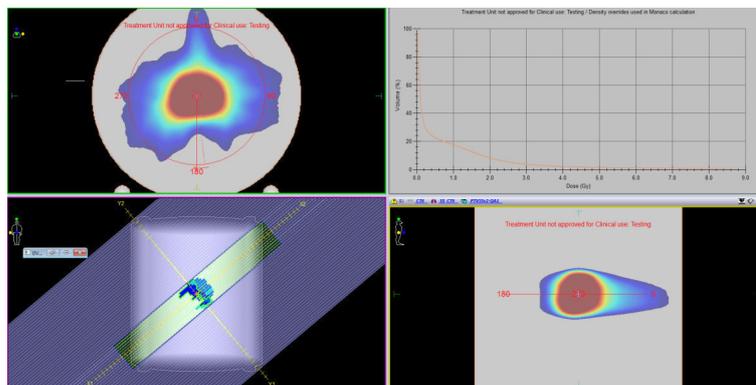


Рис. 2. Распределение реального дозиметрического плана без искажений (сохраняется: угол гантри и коллиматора, число мониторинговых единиц, отпущенных на весь план ускорителем) в цилиндрическом фантоме ArcCHECK в системе Monaco (версия 5.1)

Программное обеспечение 3DVH для цилиндрического фантома ArcCHECK позволяет проводить сравнение реального плана лечения и рассчитанного системой планирования. Результаты сравнения представляются в виде наложения двух гистограмм доза-объем (DVH), которые дают информацию о дозовой нагрузке на объем органа или мишени.

3DVH включает в себя различные модули для анализа характеристик пучка: 1) измерение отклонений радиационного изоцентра пучка относительно механического изоцентра, в зависимости от

угла гантри, 2) проверка воспроизводимости динамического плана и изменения параметров плоскостности и симметрии пучка, в зависимости от угла гантри, 3) анализ скорости вращения гантри и определение ошибки установки угла гантри, 4) алгоритм определения угла наклона гантри, под которым был доставлен терапевтический пучок на основе анализа входной и выходной дозы, 5) возможность увеличения разрешения до 5 мм с использованием функции слияния измерений, 6) возможность измерения планов с продольным размером до 36 см с использованием функции слияния измерений, и др.

При сравнении трехмерной дозы плана облучения и скорректированной трехмерной дозы, полученной измерением с ArcCHECK, в геометрии пациента используются следующие критерии: 1) оценка суммарного распределения в плане с использованием 3D DTA критерия, 2) оценка суммарного распределения в плане с использованием 3D Гамма индекса, 3) сравнения гистограмм «доза-объем», 4) оценка распределения в конкретном оконтуренном органе с использованием 3D DTA критерия, 5) оценка распределения в конкретном оконтуренном органе с использованием 3D Гамма индекса.

На рисунке 3 представлено сравнение планов лечения.

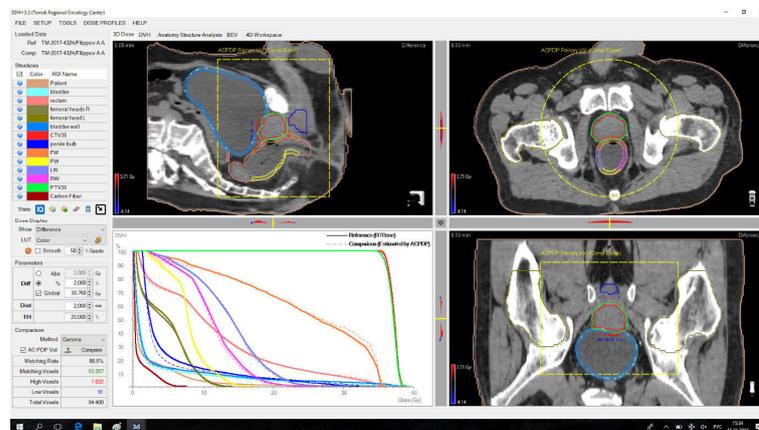


Рис. 3. Сравнение измеренного с помощью ArcCHECK и рассчитанного дозиметрического плана лечения с помощью Мопасо в виде двух гистограмм доза-объем (DVH)

Выводы. Цилиндрический дозиметрический фантом ArcCHECK и программное обеспечение 3DVH необходимы радиологическому отделению. Они позволяют не только повысить качество лучевой терапии, но и проводить проверки аппарата с высокой точностью. Верификация реального плана лечения происходит без искажений и менее чем за 5 минут с анализом причин несовпадения плана по необходимым критериям отбора. Благодаря форме дозиметрического фантома, которая имитирует форму пациента, верифицируемый план не искажается и полностью соответствует плану лечения, рассчитанного в системе планирования (значения углов стола, гантри, коллиматора остаются как в плане).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Benedict S.H., et al., Stereotactic body radiation therapy: the report of AAPM Task Group 101. Med Phys, 2010. 37(8): p. 4078-101.
2. Commissioning and quality assurance of computerized planning systems for radiation treatment of cancer. — Vienna : International Atomic Energy Agency, 2004. p. ; 24 cm. — (Technical reports series, ISSN 0074-1914 ; no. 430)

АДДИТИВНАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ПОЛУЧЕНИЯ ИЗДЕЛИЙ ИЗ КЕРАМИКИ

Н. А. Шульц, Н. В. Грунт

Научный руководитель: н. сотр, к. т. н. В. В. Промахов

Национальный исследовательский Томский государственный университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050

E-mail: schulznikita97@gmail.com

ADDITIVE TECHNOLOGY OF OBTAINING PRODUCTS FROM CERAMICS

N. A. Schulz, N. V. Grunt

Scientific Supervisor: V. V. Promakhov

National research Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050

E-mail: schulznikita97@gmail.com

***Abstract:** Created an original design of the device, which lets you create samples of thermoplastic ceramic slurry, which after sintering, are obtained ceramics with high strength and hardness parameters.*

Введение. В настоящее время в связи с достижениями в области цифровых технологий и оборудования мировая инженерная наука претерпевает революционное развитие аддитивных технологий создания деталей и элементов конструкций [1-3]. Основное отличие аддитивных технологий от традиционных методов получения изделий заключается в том, что модель (деталь или изделие) создается наращиванием тела изделия при точном объемном (3D) воспроизведении формы независимо от сложности ее поверхностей [4-6]. Аддитивные технологии становятся мощным средством сокращения времени технологической подготовки производства, изготовления и повышения качества создаваемых объектов при переходе к производству новых изделий в авиастроении, машино- и приборостроении [7].

Материалы и методы получения аддитивных керамических структур. Для объёмной печати сложнопрофильных изделий из керамики была разработана оригинальная конструкция принтера (рисунок 1) и экструдера (рисунок 1, элементы 7-9), обеспечивающего экструзию термопластичных керамических суспензий через сменную фильеру. В качестве материала использовали термопластичную суспензию, предварительно нагретую до температуры в диапазоне (70÷90)°С, подачу нагретой термопластичной суспензии через сопло осуществляли под давлением.

В качестве термопластичной суспензии использовали смесь тугоплавких порошков оксида алюминия с термопластичной связкой – парафин и/или церезин и воск. С учетом анализа данных литературных источников и экспериментальных исследований был выбран диапазона рабочей температуры экструдера в области (70÷90)°С. Выбор диапазона рабочей температуры обусловлен результатами анализа зависимости вязкости от температуры для разных термопластичных суспензий [8].

На рисунке 1 представлено схематическое изображение разработанной конструкции (3D принтера). Устройство состоит из электронного управляющего блока с установленным программным обеспечением – 10, который контролирует перемещение платформы 7 и работу редуктора 2 для регулировки давления в системе подачи воздуха из компрессора 1. Таким образом, редуктор 2 и задвижка 8 обеспечивают контроль давления в системе подачи термопластичной суспензии по тракту

трубопровода. Герметичная ёмкость 3, предназначенная для разогрева термопластичной суспензии до заданной температуры, снабжена манометром для контроля давления, нагревательными элементами и мешалкой, которая приводится в движение электродвигателем 4. Перемешивание расплавленной в емкости 3 термопластичной суспензии необходимо во избежание расслоения.

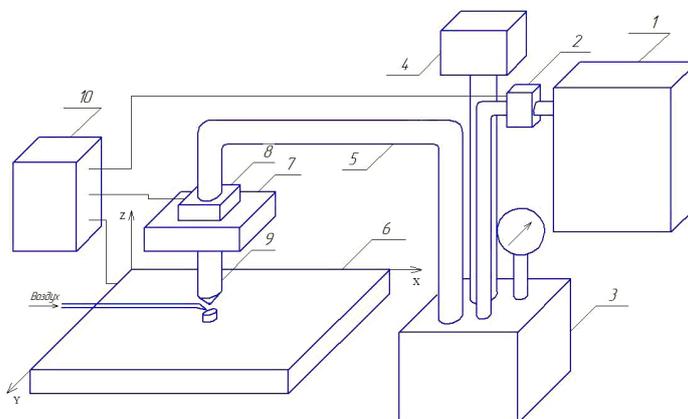


Рис. 1. Схема разработанного 3D принтера для печати керамики

С целью удаления связующих компонент, полученную после печати, заготовку отжигали в воздушной печи при температуре 1100°C . После этого проводили высокотемпературное ($t=1700^{\circ}\text{C}$) спекание образцов. Исследования структуры полученных образцов керамики проводили с использованием растрового электронного микроскопа PHILIPS SEM 515.

Результаты и их обсуждение. Установлено, что после высокотемпературного спекания образцов толщина слоя составила порядка 400 мкм что соответствовало заданной высоте слоя при перемещении экструдера. Исследования структурных особенностей полученных образцов показали, что на свободных поверхностях наблюдались отдельные агломераты спеченных частиц (рисунок 2 а), которые, по-видимому, сформировались за счет адгезии порошка оксида алюминия, в котором проводили технологическую операцию предварительного отжига с целью удаления термопластичной связки.. Установлено, что средний размер зерна Al_2O_3 составил 3 мкм. При этом максимальный размер зерна не превышал 8 мкм, рисунок 2 б. Исследования элементного состава поверхности образцов, проведенные с использованием энерго-дисперсионного анализа, показали, что материал состоит из оксида алюминия без посторонних примесей. Это свидетельствует о полном удалении термопластичной связки после спекания.

Исследования механических свойств аддитивных керамических структур на основе оксида алюминия показали, что среднее значение предела прочности образцов при испытаниях на трехточечный изгиб составило 270 МПа. Среднее значение микротвердости по Виккерсу составило 22 ГПа, при этом значение модуля упругости составило около 300 ГПа. Данные параметры не уступают прочностным свойствам образцов, полученным по классической технологии литья под давлением [8].

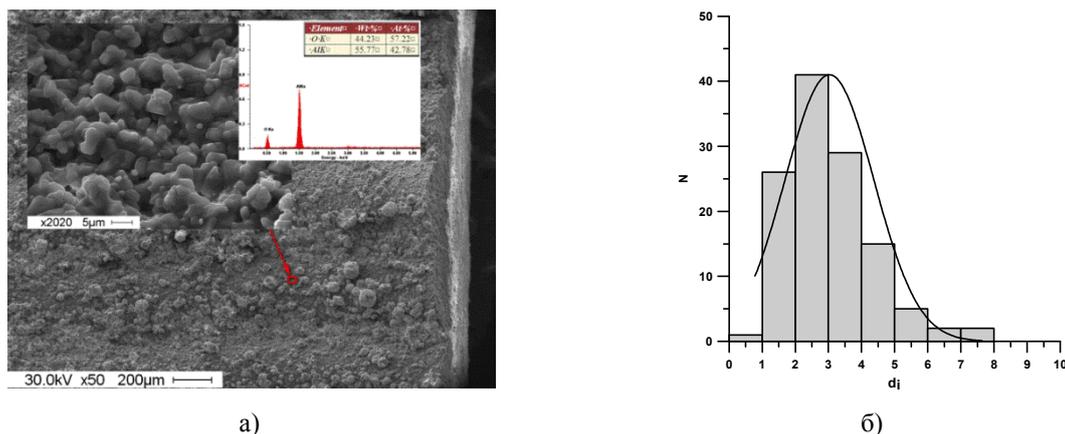


Рис. 2. а) изображение аддитивной структуры керамики б) распределение зерен оксида алюминия по размерам

Закключение. Таким образом, показана возможность получения аддитивных керамических структур из термопластичных суспензий с контролируемыми реологическими свойствами. Установлено, что после спекания полученных аддитивных керамических структур высота слоя составила около 400 мкм, средний размер зерна оксида алюминия не превышал 3-4 мкм. Результаты работы свидетельствуют о том, что внутренняя структура керамики представляет собой монолитный керамический каркас без различимых границ между горизонтальными и вертикальными (стенками) слоями материала в образцах. Значения прочности и твердости аддитивных керамических структур не уступают параметрам образцов, полученным по традиционной технологии литья под давлением.

Работа выполнена при финансовой поддержке Гранта Президента МК - 2424.2017.8 договор № 14.Y30.17.2424-МК.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. J. Will, R. Malcher, C. Treul, N. Travitzky, U. Kneser, E. Polykanriotis, R. Horch, P. Greil Porous ceramic bone scaffolds for vascularized bone tissue regeneration // Journal of Materials Science: Materials in Medicine, 2008, 19(8), 2781-2790.
2. U. Kaufmann, U. Harrysson, P. Johander, W. Bauer Free form fabrication of 3D-ceramic parts with inkjet-printing // Industrial ceramics, 2008, 28(1), 45-51.
3. Кингери У.Д. Введение в керамику – М.: Металлургия. 1967. – 495 с.
4. Seung K.L., Moretti J.D., Readey M.J. Thermal shock resistance of silicon nitride using an indentation quench test // J. Am. Ceram. Soc. 2002. V. 85. №1. P. 279 – 281.
5. Robertson G.T. Engineering applications of transformation-toughened magnesia partially stabilized zirconia // Brit. Cerm. Proc., 1990. № 46. P. 151 – 156.
6. Evans A.G. Perspectives on the development of high-toughness ceramics // J. Amer. Ceram. Cos., 1990. Vol. 73. N2. P. 187 – 206.
7. Andrew A. Buchheit, Greg E. Hilmas, William G. Fahrenholtz, and Douglas M. Deason Thermal Shock Resistance of an AlN-BN-SiC Ceramic // J. Amer. Ceram. Soc. 2009. V. 92 [6]. P. 1358-1361.
8. Добровольский А.Г. Шликерное литье – М.: Металлургия, 1977. – 240 с.

**ДИФФУЗИОННЫЕ БАРЬЕРЫ ДЛЯ ВОДОРОДА В АЛЬФА-ФАЗЕ ТИТАНА:
РАСЧЕТЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ**Ши Юй

Научный руководитель: Святкин Л.А.

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: yuy3@tpu.ru

**DIFFUSION BARRIERS FOR HYDROGEN IN ALPHA-PHASE OF TITANIUM:
FIRST-PRINCIPLES CALCULATIONS**Shi Yu

Scientific Supervisor: Svyatkin L.A.

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: yuy3@tpu.ru

***Abstract.** The results of the first-principle calculations of diffusion barriers for hydrogen atoms in the α -phase of titanium are presented. It was found that the minimal diffusion barrier corresponds to the transition from one tetrahedral interstitial to another, which takes place along the hexagonal axis (the value of this barrier is $\sim 0,19$ eV). However, this transition does not allow the hydrogen atom to move through the entire crystal volume; therefore, the diffusion jumps between tetrahedral and octahedral, and also between octahedral interstitial sites make a significant contribution to the diffusion process of hydrogen in α -titanium (the size of the barriers for these jumps vary within the range 0,45-0,75 eV).*

Введение. В течение последних десятилетий исследование системы титан-водород представляет научный интерес, поскольку Ti не только считается одним из наиболее перспективных материалов для хранения водорода обусловлено его высоким сродством к водороду (H). Титан-водород также широко используется в качестве одного из важнейших конструкционных материалов в таких областях как авиационно-космическая, морская, химическая промышленности, автомобилестроение, и т. д. [1]. Для понимания особенностей взаимодействия водорода с титаном необходимо изучить процесс диффузии водорода в титане. Целью данной работы является первопринципное исследование коэффициента диффузии водорода в системах $Ti^{16}H$ и $Ti_{16}H_2$ в зависимости от температуры.

Метод и детали расчета. В работе проведена оптимизация параметров решетки и релаксация положений всех атомов в расчетной ячейке системы титан-водород с относительной концентрацией атомов водорода $X = H/Ti$ равной 0,0625 и 0,125. Все расчеты выполнялись в рамках теории функционала электронной плотности методами псевдопотенциала и проекционных присоединенных волн, реализованными в пакете программ ABINIT [2], Обменно-корреляционные эффекты рассматривались в приближении градиентного потенциала PBE [3]. Самосогласование считалось достигнутым, когда сходимость полной энергии составляла $\sim 0,03$ мэВ. Набор k -точек для твердых растворов $Ti_{16}H$ и $Ti_{16}H_2$ составлял $8 \times 8 \times 5$. Установлено, что в твердом растворе $Ti_{16}H_2$ атомам водорода энергетически наиболее выгодно занимать ближайшие друг к другу октаэдрические междоузлия.

Результаты и выводы. Чтобы рассчитать диффузионные барьеры для атома водорода в решетке титана при относительной концентрации $X = H/Ti = 0,0625$ и $0,125$, необходимо определить все возможные неэквивалентные направления диффузионных скачков атома H в Ti. На рис. 1 представлены рассмотренные в настоящей работе неэквивалентные направления диффузионных скачков атома H в системах $Ti_{16}H$ и $Ti_{16}H_2$. Для нахождения параметров диффузионных скачков (высота барьера E_0 и длина скачка d) мы использовали алгоритм NEB (nudged elastic band), смещая атом водорода в направлении диффузионного скачка из исходного междоузлия в конечное.

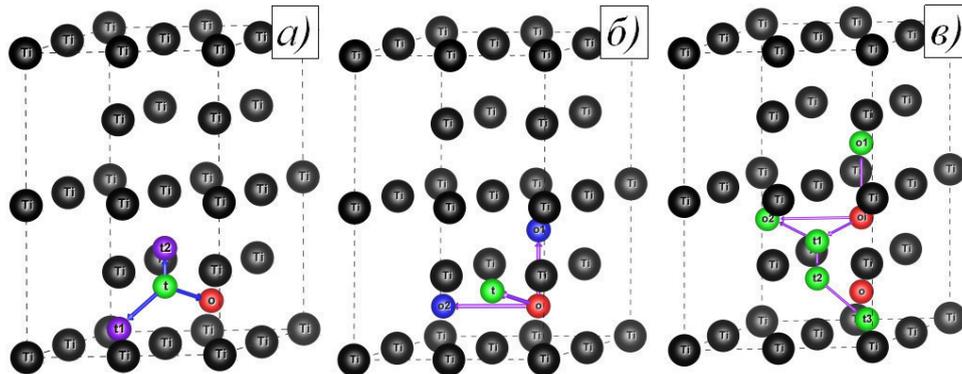


Рис. 1. Направления рассмотренных в работе неэквивалентных диффузионных скачков в системе $Ti_{16}H$ с водородом в t (а) и o (б) междоузлиях, а также в системе $Ti_{16}H_2$ (в)

Таблица 1

Параметры диффузии атома водорода в системе Ti-H

Система	Путь диффузии	Высота барьера E_0 , эВ	Длина скачка d , Å	Коэффициент C , эВ/Å ²	Частота колебаний f , ТГц	Коэффициент D_0 , мм ² /с
$Ti_{16}H$	$o \rightarrow o1$	0,749	2,206	1,742	29,07	0,707
	$o \rightarrow o2$	1,908	2,786	1,435	26,38	3,414
	$o \rightarrow t$	0,610	1,708	1,382	25,90	1,260
	$t \rightarrow t1$	1,523	1,977	3,430	40,80	5,312
	$t \rightarrow t2$	0,190	0,988	2,317	33,53	3,275
	$t \rightarrow o$	0,468	1,710	2,959	37,89	3,692
$Ti_{16}H_2$	$oi \rightarrow o1$	0,727	2,182	1,779	29,38	1,399
	$oi \rightarrow o2$	1,912	3,136	1,324	25,34	4,155
	$oi \rightarrow t1$	0,609	1,703	1,337	25,47	2,460
	$t2 \rightarrow t3$	1,041	1,717	2,988	38,08	5,610
	$t1 \rightarrow t2$	0,213	0,983	2,993	38,11	3,682
	$t1 \rightarrow o2$	0,469	1,878	2,651	35,86	6,325

Предэкспоненциальный множитель D_0 в уравнении Аррениуса оценивался в нашей работе как

$$D_0 = \frac{f \cdot d^2}{N}, \quad (1)$$

где f – частота колебаний атома водорода в исходном междоузлии, N – количество эквивалентных диффузионных скачков атома водорода из начального междоузлия. В нашей работе величина частоты f оценивалась с помощью квадратичной аппроксимации зависимости энергии E в направлении «седловой» точки от величины этого смещения:

$$f \approx \frac{\sqrt{\frac{2C}{m_p}}}{2\pi}, \quad (2)$$

где C – коэффициент квадратичного члена в зависимости полной энергии E кристалла от величины смещения атома водорода из исходного междоузлия, m_p – масса ядра атома водорода. Результаты расчетов параметров диффузионных скачков приведены в таблице 1.

Из таблицы 1 видно, что минимальный барьер диффузии соответствует скачку $t \rightarrow t_2$ в системе $Ti_{16}H$ и скачку $t_1 \rightarrow t_2$ в системе $Ti_{16}H$ (величина этих барьера $\sim 0,19$ и $0,21$ эВ, соответственно). Однако из рис. 1а видно, что данный переход не может быть рассмотрен в качестве единственного основного механизма миграции водорода в титане, поскольку данный переход не позволяет атому водорода перемещаться по всему объему кристалла. Процесс диффузии водорода в решетке титана также будет определяться диффузионными скачками между тетраэдрическими и октаэдрическими, а также только между октаэдрическими междоузлиями (величина этих барьеров варьируется в пределах $0,46-0,75$ эВ). В работе согласно уравнению Аррениуса построена зависимость коэффициента диффузии водорода D от температуры T (рис. 2). Из рисунка 2 видно, что зависимость $D(1/T)$ для диффузионных скачков $t \rightarrow t_2$ в системе $Ti_{16}H$ и $t_1 \rightarrow t_2$ в системе $Ti_{16}H$ хорошо согласуется экспериментальной зависимостью, полученной в работе [4]. Из рисунка 2 также видно, что коэффициенты диффузии водорода в системе $Ti_{16}H_2$ больше, чем в системе $Ti_{16}H$ для аналогичных диффузионных скачков.

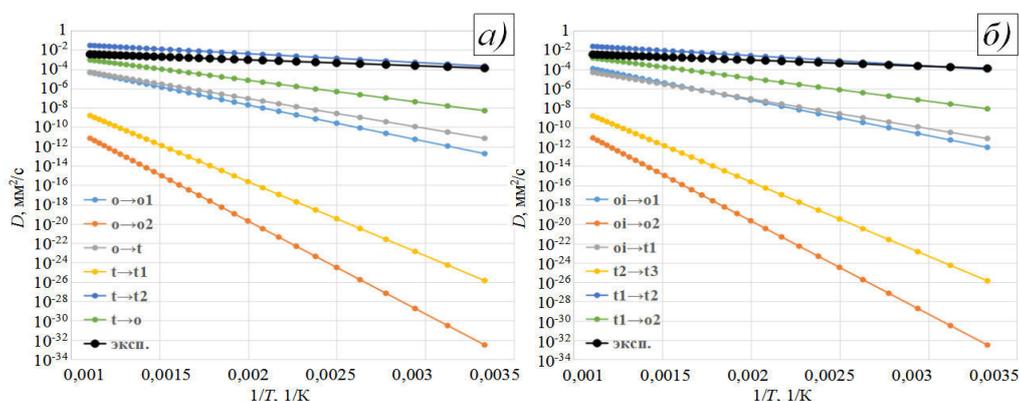


Рис. 2. Зависимость коэффициента диффузии от температуры в системах $Ti_{16}H$ (а) и $Ti_{16}H_2$ (б)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lutjering G., Williams JC. Titanium. 2nd ed. Springer. 2007 г. 10с.
2. ABINIT – abinit [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.abinit.org> – 21.12.16.
3. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple // Phys. Rev. Lett. – 1996. – Vol. 77. – № 18. – P. 3865-3868.
4. Wasilewski R.J., Kehl G.L., Metallurgia. Lett. – 1954. – Vol. 50. – P. 225.

УДАЛЕНИЕ ВОДОРОДА ИЗ Ti VT 1-0 ПОД ДЕЙСТВИЕМ УСКОРЕННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ

Ян Хан, Лю Юйчжен, М.Н. Бабихина

Научный руководитель: ассистент, к.ф.-м.н. В.С. Сыпченко

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: 1239201854@qq.com

REMOVAL OF HYDROGEN FROM Ti VT 1-0 UNDER ACTION OF ACCELERATED ELECTRONS

Yang Hang, Liu Yuchen, M.N. Babikhina

Scientific Supervisor: Assistant, PhD V.S. Sypchenko

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: 1239201854@qq.com

Abstract. *The process of hydrogen removal from titanium of VT1-0 grade under the action of accelerated electrons has been studied experimentally. The irradiation was carried out by an electron beam with energies of 25-40 keV during 15-60 min. The information on the hydrogen content in samples from titanium of VT1-0 grade has been obtained both before and after irradiation with accelerated electrons. The activation energy of hydrogen desorption from titanium has been calculated. It was found that the increase of the time and the energy of an irradiation lead to the decrease of the residual hydrogen content in the titanium samples.*

Введение. Проблема водорода в металлах и сплавах постоянно находится в центре внимания широкого круга исследователей: физиков, химиков, металлургов и др. Интерес к этой проблеме из года в год растет. С одной стороны интерес связан, с наибольшим накоплением водорода в водородных аккумуляторах, с целью дальнейшего использования водорода в качестве топлива, а с другой, удаление водорода из конструкционных материалов, без разрушения или изменения самого материала. Одним из способов извлечения водорода без изменения свойств металла является радиационная десорбция, а именно, удаления водорода в процессе облучения ускоренными электронами. В связи с этим, целью является получение закономерностей выхода водорода из титана марки VT1-0 под воздействием ускоренных электронов разных энергий.

Методика эксперимента. Изучение миграции и выхода водорода из технически чистого титана марки VT1-0 производилось под воздействием ускоренных электронов масс-спектрометрическим методом (in situ) [1]. Объектом исследования являлись образцы титана марки VT1-0 размером 5×7 мм. Облучение ускоренными электронами производилось с энергиями от 25 до 40 кэВ и плотность пучка электронов $j=25.5 \text{ мкА}\cdot\text{см}^{-2}$ со временем облучения от 15 до 60 мин. Насыщенные образцов водородом производилось электролитическим методом, в течение 120 мин при плотности тока $j=0.48 \text{ А}\cdot\text{см}^{-2}$ в 1М электролитическом растворе H_2SO_4 . Перед облучением ускоренными электронами образцы нагревали до температуры ~250 °С, после достижения и стабилизации указанной температуры образцы облучались. Исследуемые образцы размещались в вакуумной ячейке на изолирующей керамической подложке. Температура образцов измерялась с лицевой стороне образца термопарой.

Содержания водорода определялось на анализаторе водорода RHEN602 фирмы LECO. Энергию активации десорбции (E_d) определялась из десорбционных спектров, по формуле Редхеда [2]

$$E_d = kT_{\max} \left(\ln \frac{v_1 T_{\max}}{\beta} - 3.64 \right)$$

где β – скорость нагрева (для термдесорбции $\beta=1$ град/с), $v_1 \sim 10^{13} \text{ c}^{-1}$ – собственная частота колебаний кристаллической решетки (частотный фактор десорбции), k – коэффициент Больцмана, T_{\max} – температура, соответствующая максимальной интенсивности.

На рис. 1 представлены результаты содержания водорода в титане VT1-0 после облучения в зависимости от времени облучения. Из рисунка видно, что при облучении электронами вплоть до 30 мин наблюдается уменьшение содержания водорода в образце, а при времени облучения более 30 мин водород в из образца удалялся почти полностью, согласно данным анализатора водорода RHEN602.

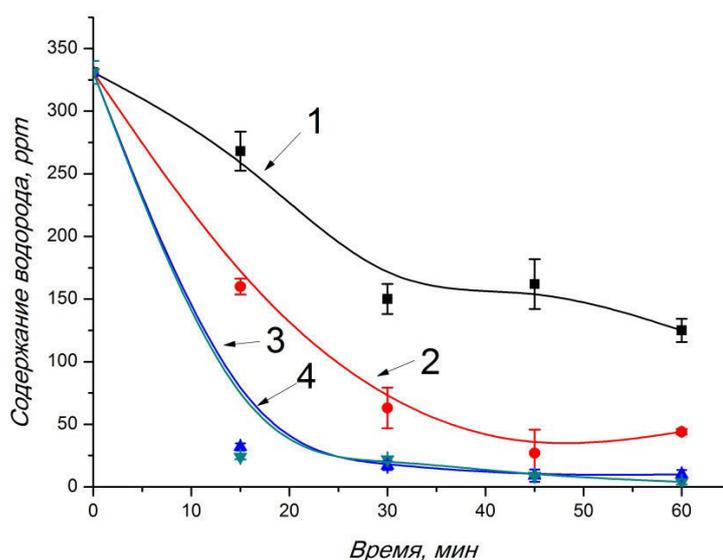


Рис.1. Зависимость содержания водорода в титане VT1-0 после облучения ускоренными электронами от времени облучения: 1 – 25 кэВ, 2 – 30 кэВ, 3 – 35 кэВ, 4 – 40 кэВ

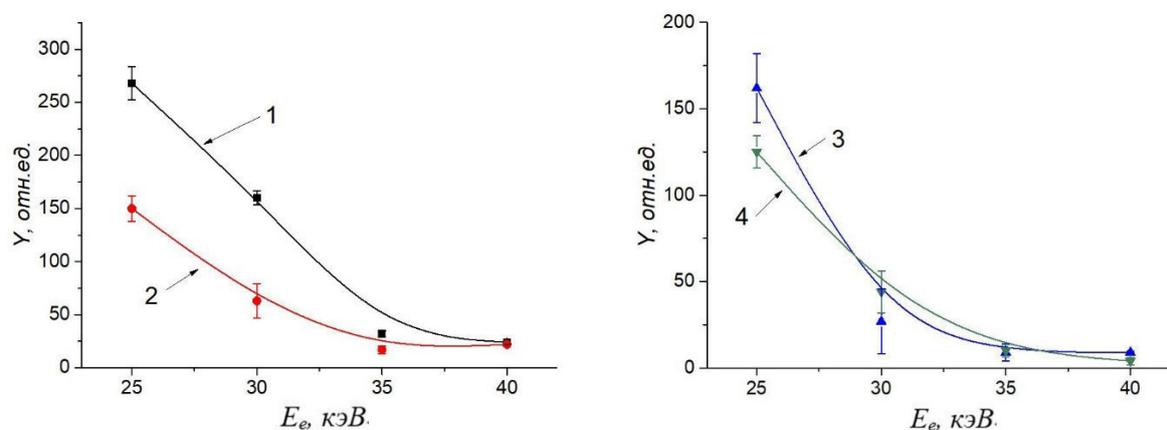


Рис. 2. Зависимость содержания водорода от энергии облучения: 1–15 мин; 2–30 мин; 3–45 мин; 4–60 мин

На рис. 2 представлены зависимости содержания водорода от энергии облучения, при разных временах облучения (для наглядности зависимости были разнесены). Из рис. 2 можно видеть, что по мере увеличения энергии ускоренных электронов уменьшается содержание водорода в исследуемых образцах. Это явление слабо проявляется на энергиях 25-35 кэВ и сильнее на энергиях 35-40 кэВ, так что дальнейшее увеличение энергии (выше 40 кэВ) ускоренных электронов не приводит к большему удалению водорода из образцов титана VT1-0.

На рис. 3, в качестве примера, представлен спектр выхода водорода, полученный во время облучения ускоренными электронами, на основании этих результатов рассчитаны E_d водорода (таб. 1). Из данных представленных в таб. 1 следует, что на энергию активации десорбции не влияет ни энергия, ни время облучения.

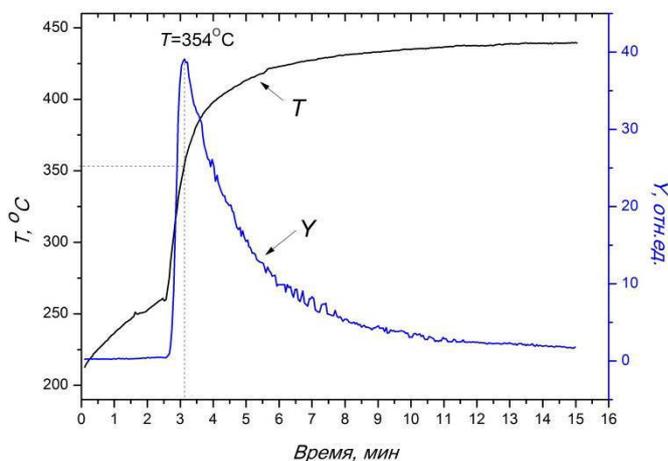


Рис.3. Спектр выхода водорода, $E_e=35\text{кэВ}$,
 $t_{об} = 30\text{мин}$

Таблица 1

Энергии активации десорбции водорода

E_e , кэВ	E_d , эВ (при облучении ускоренными электронами)	E_d , эВ (при термо-десорбции)
исходный		2.65 ± 0.11
25	1.8 ± 0.1	2.87 ± 0.07
30	1.65 ± 0.04	2.97 ± 0.03
35	1.70 ± 0.12	3.01 ± 0.12
40	1.71 ± 0.11	2.96 ± 0.10

Полученные результаты (таб. 1) показывают, что при облучении ускоренных электронов E_d водорода в 1.5–2 раза ниже, чем при термической десорбции. Причина может быть связано с неравновесным характером десорбции водорода в условиях радиационного воздействия [3, 4].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. N. N. Nikitenkov, A. M. Hashhash, I. A. Shulepov. A Plant for Studying Radiation and Thermal Desorption of Gases from Inorganic Materials Instruments and Experimental Techniques, 2009, Vol. 52, No. 6, pp. 865–87
2. D.P. Woodrouff, T.A. Delchar, Modern Techniques of Surface Science, 2 ed, Cambridge University Press, 1994, 586 p.
3. Yu.I. Tyurin, N.N. Nikitenkov, I.T. Sigfusson, A. Hashhash, Van Yaomin, A.S. Dolgov, L.I. Semkina. Diffusion and release of hydrogen from metals under the effect of ionizing radiation // Vol.131, September 2016, P. 73–80.
4. Tyurin and I. Chernov, Non-equilibrium release of atomic hydrogen from metals under irradiation, Int. J. Hydrogen Energy, 2002, Vol. 27. 829–835.



Компания Хеликон обеспечивает полный рабочий процесс необходимым оборудованием и расходными материалами для молекулярной и клеточной биологии и прикладных исследований.

ДЕЛАЕМ ВОЗМОЖНОЙ РАБОТУ ЛАБОРАТОРИЙ В РОССИИ НА МИРОВОМ УРОВНЕ



ООО «Компания Хеликон» поставляет передовые решения ведущих мировых брендов и производит лабораторное оборудование для молекулярной биологии.

Подробнее на сайте www.helicon.ru



ДОСТАВКА



ОБУЧЕНИЕ



**СЕРВИСНОЕ
ОБСЛУЖИВАНИЕ**



**МЕТОДИЧЕСКАЯ
ПОДДЕРЖКА**

Центральный офис:

119991 г. Москва, Ленинские Горы, МГУ, д. 1, стр. 40
Тел. 8 [800] 770-71-21 Факс +7 [495] 930-00-84
mail@helicon.ru

www.helicon.ru

Представительство в Сибирском регионе:
630090 г. Новосибирск, ул. Инженерная, 28
Тел. +7 [383] 207-84-85, novosibirsk@helicon.ru

Представительство в Северо-Западном Регионе:
195220 г. Санкт-Петербург, ул. Гжатская д. 22 корп. 1
Тел. +7 [812] 244-85-52, spb@helicon.ru

Представительство в Приволжском регионе:
420021 г. Казань, ул. Татарстан, д. 14/59, оф. 201
Тел. +7 [843] 202-33-37, volga@helicon.ru

Представительство в Южном регионе:
344116 г. Ростов-на-Дону, ул. 2-ая Володарская, д. 76/23а
Тел. +7 [863] 294-87-66, rostov@helicon.ru



Компания СкайДжин предлагает к поставке со склада в Москве и под заказ наборы реагентов, оборудование, расходные материалы, реактивы, а также специализируется на сервисном обслуживании и поверке дозаторов, лабораторных весов различных производителей. Мы предлагаем гибкие условия работы и очень большой ассортимент продукции.

Поставляемая нашей компанией продукция широко используется в научно-исследовательских лабораториях и R&D центрах, лабораториях секвенирования, при решении практически любых молекулярно-биологических задач.

Большая часть производителей в нашем портфолио - это прямые, эксклюзивные поставки. Мы являемся первым звеном в поставках для таких компаний как New England Biolabs, Agilent Technologies, Oxford Nanopore Technologies, QIAGEN, 10x Genomics, NIMAGEN, Integrated DNA Technologies, Thermo Fisher Scientific, SIGMA-ALDRICH, BioSan, Gilson.

К флагманским продуктам наших линеек относятся:

- Набор для пробоподготовки образцов от New England Biolabs ULTRA II FS с интегрированной системой фрагментации и другие наборы серии ULTRA для образцов ДНК, РНК и микроРНК;
- Digital NGS: готовые панели и наборы для обогащения на основе ПЦП от QIAGEN с мономолекулярным баркодированием;
- Специализированные наборы для работы с микроРНК и анализа экспрессии от QIAGEN-Exiqon;
- Уникальная система Chromium производства 10x Genomics для автоматической пробоподготовки геномов и транскриптомов единичных клеток.

За дополнительной информацией о производителях, товарах, ценах и условиях поставки обращайтесь к нашим квалифицированным специалистам:

Тел: 8 (495) 215 02 22

info@skygen.com

Бесплатная линия: 8 (800) 333 12 26

www.skygen.com

Будем рады ответить на Ваши вопросы и помочь выбрать качественное и недорогое решение для Ваших задач!





**Магистерская программа по направлению 22.04.01
Материаловедение и технология материалов**

Производство изделий из наноструктурных материалов



- **Магистерская программа двойного диплома Double-Degree:** магистрант может получить два диплома: диплом ТПУ и диплом Université Grenoble Alpes
- **Индивидуальный подход в обучении:** мы предлагаем вам обучаться по индивидуальному учебному плану и освоить ряд дисциплин дистанционно.
- **Лучшие условия для научной работы:** 40 единиц высокотехнологичного и аналитического оборудования, исследования с зарубежными партнерами
- **Практика в ведущих университетах мира:** Université Grenoble Alpes, France; Université de Montreal, Canada; Feng Chia University, Republic of China; Université de Lorraine, France; НИТУ «МИСиС», Москва
- **Места работы наших выпускников:** MERZ Freedom Technologies, Germany; Казахский национальный университет, Казахстан; Карагандинский государственный университет, Казахстан; Гжельский завод «Электроизолятор», Москва; ООО «Уралспецтранс», Екатеринбург; ЗАО «НЭВЗ-КЕРАМИКС», Новосибирск; ОАО «ТомскНИПИнефть», Томск; НПФ «МИКРАН», Томск; ООО «Томскнефтехим», Томск; НПЦ ОАО «Полюс», Томск; ОАО «Манотомь», Томск; АО «Сибхимкомбинат», Северск и др.

Приглашаем на экскурсию и беседу

Хасанов Олег Леонидович, директор Нано-Центра ТПУ, +7 (3822) 42-72-42, khasanov@tpu.ru
Годымчук Анна Юрьевна, доцент ТПУ, +7-906-947-50-27, vk.com/annagodymchuk, godymchuk@tpu.ru
 г.Томск, 634050, проспект Ленина, 2, корпус 15 ТПУ

 <https://vk.com/nanotpu>  <http://web.tpu.ru/webcenter/portal/nano/>  <https://www.facebook.com/nanotpu>



Научное издание

ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ НАУК

Том 1. Физика

Сборник научных трудов
XV Международной конференции студентов, аспирантов
и молодых ученых

Компьютерная верстка *С.А. Поробова*

Подписано к печати 29.06.2018 г. Формат 60×84¹/₈.

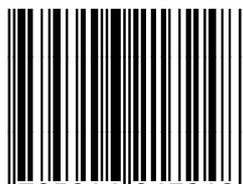
Бумага для офисной техники. Гарнитура Times.

Усл. печ. л. 43,7.

Тираж 500 экз. Заказ № 3320.

Отпечатано на оборудовании
Издательского Дома
Томского государственного университета
634050, г. Томск, пр. Ленина, 36
Тел.: 8+(382-2)-52-98-49
Сайт: <http://publish.tsu.ru>
E-mail: rio.tsu@mail.ru

ISBN 978-5-94621-724-8



9 785946 217248