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

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

Том 1. Физика

РОССИЯ, ТОМСК, 25 – 28 апреля 2017 г.

PROSPECTS OF FUNDAMENTAL SCIENCES DEVELOPMENT

XIV International Conference of students, graduate students
and young scientists

Volume 1. Physics

RUSSIA, TOMSK, April 25 – 28, 2017

Издательство Томский политехнический университет

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

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

Том 1. Физика

РОССИЯ, ТОМСК, 25 – 28 апреля 2017 г.

PROSPECTS OF FUNDAMENTAL SCIENCES DEVELOPMENT

XIV International Conference of students, graduate students
and young scientists

Volume 1. Physics

RUSSIA, TOMSK, April 25 – 28, 2017

Томск 2017

ПРОГРАММА ПОВЫШЕНИЯ КВАЛИФИКАЦИИ

Химический факультет и Институт дистанционного образования Томского государственного университета приглашает дипломированных специалистов пройти программу повышения квалификации

«СОВРЕМЕННЫЕ ТЕНДЕНЦИИ В ПОЛУЧЕНИИ И ИССЛЕДОВАНИИ ФУНКЦИОНАЛТНЫХ МАТЕРИАЛОВ»

Направление 04.03.01 Химия

Модульная структура обучения:
Модуль 1: Новые подходы и технологии в получении функциональных материалов
Модуль 2: Методы исследования структуры, состава и физико-химических свойств функциональных материалов

Профессиональные компетенции, формируемые в результате обучения:

- теоретическими знаниями в области современных методов получения функциональных материалов и изучения их физико-химических характеристик;
- умением выбирать необходимые методы и подходы к разработке функциональных материалов исходя из постановки задач и формы представления данных;
- основами технологии получения каталитических, фармацевтических, сорбционных, металлических и других функциональных материалов;
- умением выбирать необходимые методы анализа, исходя из постановки задач и формы представления данных;
- навыками работы на современном лабораторном оборудовании по аналитическому контролю материалов;
- навыками интерпретации полученных экспериментальных данных полученных на современном оборудовании при использовании физических и физико-химических методов исследования материалов.

Обучение в рамках образовательной программы реализуют ученые с высокой научной квалификацией из ведущих научных организаций РФ. Практическая часть курса проводится с использованием современного аналитического и исследовательского оборудования Лаборатории каталитических исследований и Лаборатория трансляционной клеточной и молекулярной биомедицины ТГУ, Научно-образовательного центра «Наноматериалы и нанотехнологии» ТПУ.

КОНТАКТЫ

Руководитель программы: Слижов Юрий Геннадьевич, к.х.н., доцент, декан химического факультета ТГУ, dekanat@chem.tsu.ru.

Координатор программы: Зыкова Анна Петровна, к.ф.-м.н., доцент ТПУ, zykovaap@mail.ru.

АДРЕС

г. Томск, ул. А. Иванова, 49, корпус № 6, Химический факультет ТГУ

УДК 501(063)
ББК 20л0
П278

П278 **Перспективы развития фундаментальных наук** [Электронный ресурс]: сборник трудов XIV Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых. Россия, Томск, 25–28 апреля 2017 г. / под ред. И.А. Курзиной, Г.А. Вороновой. – Томск: Изд-во – Национальный Исследовательский Томский политехнический университет, 2017. – Режим доступа: http://science-persp.tpu.ru/Arch/Proceedings_2017_vol_1.pdf – 464с.

ISBN 978-5-4387-0748-6
ISBN 978-5-4387-0749-3

Сборник содержит труды участников XIV Международной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Перспективы развития фундаментальных наук». Включает доклады студентов, аспирантов и молодых ученых, представленные на секции «Физика». Сборник представляет интерес для студентов, аспирантов, молодых ученых и преподавателей.

УДК 501(063)
ББК 20л0

Редакционная коллегия

И.А. Курзина, доктор физико-математических наук, доцент;
Г.А. Воронова, кандидат химических наук, доцент;
С.А. Поробова

ISBN 978-5-4387-0748-6
ISBN 978-5-4387-0749-3

© ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», 2017
© Томский политехнический университет, электронный текст, 2017

СЕКЦИЯ ФИЗИКА

- физика конденсированного состояния
- физика поверхности
- физика ускорителей
- водородная энергетика
- геофизика
- моделирование физических процессов

ОГЛАВЛЕНИЕ

СЕКЦИЯ «ФИЗИКА»

RESEARCH OF X-RAY TUBE ENERGY CHARACTERISTICS
A.A. Baulin, E.S. Sukhih, L.G. Sukhih 15

INVESTIGATION OF THE 3-D POLYMER SCAFFOLDS WITH MINERALIZED SURFACE FOR TISSUE ENGINEERING VIA ELECTROSPINNING TECHNOLOGY
R.V. Chernozem 18

INFLUENCE OF HEATING TEMPERATURE ON THE ALUMINUM USED FOR ELECTRIC CABLES
L. Fellah, A. Diha 21

GENERATOR OF LOW-TEMPERATURE PLASMA FOR NUCLEOPLASTY
E.A. Korotina, A.S. Abrosimova 24

ВЛИЯНИЕ ЛЕГИРОВАНИЯ ВАНАДИЕМ НА СТРУКТУРУ, ФАЗОВЫЙ СОСТАВ И МИКРОТВЕРДОСТЬ ВЫСОКОАЗОТИСТОЙ АУСТЕНИТНОЙ СТАЛИ, ПОДВЕРГНУТОЙ КРУЧЕНИЮ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ
Г.Г. Майер, Е.В. Мельников, В.А. Москвина 27

INVESTIGATION OF THE APPLIED VOLTAGE INFLUENCE ON THE IONIZING RADIATION PARTICLES DETECTING BY DIAMOND DETECTORS
V.V. Okhotnikov, S.A. Linnik, A.V. Gaydaychuk 30

APPROACHES FOR SUBSTRATE FUNCTIONALISATION WITH SILVER NANOPARTICLES
A.A. Sharonova, M.A. Surmeneva 33

МИКРОСТРУКТУРА И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СТАБИЛЬНОЙ АУСТЕНИТНОЙ СТАЛИ ПОСЛЕ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ
С.А. Аккузин 36

ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЙ ГИДРОФИЛЬНЫХ СВОЙСТВ МИКРОРАЗМЕРНОГО ПОРОШКА ZrO_2(Mg)
В.П. Алексеенко 39

ВЛИЯНИЕ МОЩНОГО УЛЬТРАЗВУКОВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ В ПРОЦЕССЕ ПРЕССОВАНИЯ НА СТРУКТУРУ КЕРАМИКИ ИЗ ОКСИДА ЦИНКА
Т.Р. Алишин, О.С. Толкачёв 42

СЕНСОРЫ ВОДОРОДА НА ОСНОВЕ ТОНКИХ ПЛЕНОК ДИОКСИДА ОЛОВА С ДОБАВКАМИ Y И Ag В ОБЪЕМЕ В РЕЖИМЕ ТЕРМОЦИКЛИРОВАНИЯ
А.В. Алмаев 45

ПЛАЗМОХИМИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ ОКСИДНЫХ КОМПОЗИЦИЙ ДЛЯ ДИСПЕРСИОННОГО ЯДЕРНОГО ТОПЛИВА
Е.С. Алюков, И.Ю. Новоселов 48

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ЗАЖИГАНИЯ КАПЕЛЬ ОРГАНОВОДОУГОЛЬНОГО ТОПЛИВА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ANSYS FLUENT
Д.В. Антонов 51

КРАЕВЫЕ ЭФФЕКТЫ ИЗМЕНЕНИЯ КОНЦЕНТРАЦИИ ВОДОРОДА В НАВОДОРОЖЕННОМ ЦИРКОНИЕВОМ СПЛАВЕ
А.А. Асхатов 54

МЕТОДИКА ИЗМЕРЕНИЯ ВЫСОКИХ КОНЦЕНТРАЦИЙ ВОДОРОДА НА АНАЛИЗАТОРЕ ВОДОРОДА RHEN602 ФИРМЫ LECO
М.Н. Бабихина 57

ВЛИЯНИЕ ЛАЗЕРНОЙ ОБРАБОТКИ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА НИТРОЦЕМЕНТОВАННОЙ СТАЛИ
Ю.С. Бахрачева 60

НИЗКОТЕМПЕРАТУРНАЯ ТЕПЛОЁМКОСТЬ ГРАФЕНА
А.А. Белослудцева, Л.Д. Баркалов 63

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕОДНОРОДНОЙ ДЕФОРМАЦИИ ЛЕНТОЧНЫХ АМОРФНЫХ СПЛАВОВ В УСЛОВИЯХ НАГРЕВА С ПОСТОЯННОЙ СКОРОСТЬЮ
А.Д. Березнер 66

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ КОЛЛИМИРОВАННОГО НЕЙТРОННОГО ПУЧКА С РАЗЛИЧНЫМИ ФАНТОМАМИ ГОЛОВНОГО МОЗГА
А.С. Бусыгин, М.Н. Аникин 69

МИКРО- И МАКРОПРОЧНОСТЬ КЕРАМИКИ С БИМОДАЛЬНОЙ ПОРОВОЙ СТРУКТУРОЙ
А.С. Буяков, Е.О. Васильева, Д.А. Ткачев 72

ВЛИЯНИЕ ВОДОРОДА НА ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ТОНКОЙ ПЛЁНКИ ОКСИДА АЛЮМИНИЯ НА ТИТАНЕ ВТ1-0
Ван Цайлунь, Е.Д. Даулетханов, Инь Шаньшань 75

ИЗУЧЕНИЕ IN SITU ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АТОМАРНОГО ВОДОРОД С ПОВЕРХНОСТЬЮ ТВЕРДЫХ ТЕЛ ЛЮМИНСЦЕНТНЫМИ МЕТОДАМИ
Ван Яомин, Н.Д. Толмачева, Н.Н. Никитенков 78

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ IN SITU ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ДИФФУЗИИ КИСЛОРОДА В ОКСИДАХ С КИСЛОРОДНОЙ ПРОВОДИМОСТЬЮ
З.С. Винокуров, Н.Ф. Еремеев 81

ОРИЕНТАЦИОННАЯ И ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ В МОНОКРИСТАЛЛАХ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНОГО СПЛАВА $FeNiCoCrAl_{0,3}$
А.В. Выродова, В.В. Поклонов, З.В. Победенная 84

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ОБЪЕМА И ПОВЕРХНОСТИ ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ GdY_2Si_2 (Y = Cu, Ag, Au)
А.Ю. Вязовская 87

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИЗУЧЕНИЕ ТЕНЗОРНОЙ АНАЛИЗИРУЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ РЕАКЦИИ $\gamma d \to pp\pi^-$
В.В. Гаузштейн, А.Ю. Логинов 90

ВЛИЯНИЕ РАЗМЕРОВ ТРАПЕЦИЕВИДНОГО ЛОКАЛЬНОГО ИСТОЧНИКА ЭНЕРГИИ НА ЭВОЛЮЦИЮ ЛАМИНАРНЫХ ТЕПЛОВЫХ ФАКЕЛОВ В ЗАМКНУТЫХ КОНТУРАХ
Н.С. Гибанов 93

НАНОСТРУКТУРНАЯ КЕРАМИКА НА ОСНОВЕ ZrO_2, ПОЛУЧЕННАЯ ПО АДДИТИВНОЙ ТЕХНОЛОГИИ
Н.В Грунт, Н.А. Шульц, В.В. Промахов 96

ВЛИЯНИЯ МОДИФИЦИРОВАНИЯ СТАЛИ 110Г13Л НА СРЕДНИЙ РАЗМЕР ЗЕРЕН И ВКЛЮЧЕНИЙ
Т.В. Дement 99

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОПТИМАЛЬНОЙ КОМПОНОВКИ АКТИВНОЙ ЗОНЫ РЕАКТОРА ИРТ-Т ДЛЯ ДОСТИЖЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОГО ОБЛУЧЕНИЯ СЛИТКОВ КРЕМНИЯ БОЛЬШОГО ДИАМЕТРА
С.К. Дмитриев, И.И. Лебедев, М.Н. Аникин 102

ЭНЕРГОЭФФЕКТИВНАЯ ПЛАЗМЕННАЯ ОБРАБОТКА ПРОМЫШЛЕННЫХ ОТХОДОВ
СВ. Егоров, А.А. Каренгин 105

ЗАВИСИМОСТЬ КИНЕТИЧЕСКОЙ ЭНЕРГИИ ЕДИНИЦЫ ДЛИНЫ ДИСЛОКАЦИОННОЙ ПЕТЛИ В ФОРМЕ ОКРУЖНОСТИ ОТ РЕШЕТОЧНОГО И ПРИМЕСНОГО ТРЕНИЯ
А.С. Елисеев 108

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОЛИТНО-ПЛАЗМЕННОГО АЗОТИРОВАНИЯ НА ФАЗОВЫЙ СОСТАВ ПЕРЛИТНОЙ СТАЛИ
Л.А. Ерыгина, Н.А. Попова, Е.Л. Никоненко, М.К. Скаков 111

ДВУСТОРОННИЙ ЭФФЕКТ ПАМЯТИ ФОРМЫ В ДВУХФАЗНЫХ (β+γ) МОНОКРИСТАЛЛАХ СПЛАВА $Co_{38}Ni_{33}Al_{29}$
А.С. Ефтифеева 114

АНАЛИЗ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ И РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ СИСТЕМЫ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ СОСТОЯНИЙ ν_6, ν_4, ν_8, ν_7, и ν_{10} ИЗОТОПОЛОГА ЭТИЛЕНА C_2H_3D
С.А. Жданович 117

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЛИННЫХ ВОЛН ТИПА ЦУНАМИ С ЗАТОПЛЕННОЙ ПРЕГРАДОЙ РАЗЛИЧНОЙ ТОЛЩИНЫ
К.Н. Жильцов, К.В. Костюшин, И.М. Тырышкин 120

МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ УЧАСТКА ФОРМИРОВАНИЯ СПЕКТРА НЕЙТРОННОГО ПОТОКА ДЛЯ НЕЙТРОН-ЗАХВАТНОЙ ТЕРАПИИ
Е.А. Загуменный, М.Н. Аникин 123

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПЛАЗМЕННОЙ КОНВЕРСИИ ОТВАЛЬНОГО ГЕКСАФТОРИДА УРАНА
Н.В. Тундешев, Р.У. Кулиев, В.В. Зубов 126

ИССЛЕДОВАНИЕ УСЛОВИЙ ЗАРЯЖАНИЯ ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ НАЧАЛЬНОЙ СКОРОСТИ МЕТАНИЯ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ НАЧАЛЬНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ
А.И. Зыкова, А.С. Дьячковский 129

ИССЛЕДОВАНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА МОЛЕКУЛЫ ТРАНС-$C_2H_2D_2$ В ДИАПОЗОНЕ 1450-1650 $СМ^{-1}$
А.Г. Зятькова 132

МОДИФИКАЦИЯ Ni НАНОТРУБОК ПУТЕМ ИМПЛАНТАЦИИ ИОНОВ C^{3+}
А.Д. Ибраева, А.Л. Козловский, Д.И. Шлимас 135

ВЛИЯНИЕ ПОДСЛОЯ УГЛЕРОДА И ТИТАНА НА ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПЛЕНКИ НИТРИДА АЛЮМИНИЯ НА КРЕМНИИ
Инь Шаньшань, С.К. Павлов, Ван Цайлунь 138

ИССЛЕДОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ РАСПРОСТРАНЕНИЯ РЭЛЕЕВСКОЙ ВОЛНЫ В ТИТАНОВОМ СПЛАВЕ ВТ6
Инь Хуавэй 141

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СВЕРХЗВУКОВЫХ СТРУЙ С ПОВЕРХНОСТЬЮ МЕСТА ПОСАДКИ ПЛАТФОРМЫ «ЭКЗОМАРС»
А.М. Кагенов, К.В. Костюшин, И.В. Еремин 144

ИССЛЕДОВАНИЕ КЛИНИЧЕСКОЙ ПРИМЕНИМОСТИ ПЛОСКОПАРАЛЛЕЛЬНОЙ ИОНИЗАЦИОННОЙ КАМЕРЫ PPC40 ДЛЯ ОРТОВОЛЬТНОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ
С.А. Кадочникова, А.А. Баулин, Е.С. Сухих 147

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ЦИНК- И МЕДЬ-СОДЕРЖАЩИХ КАЛЬЦИЙФОСФАТНЫХ ПОКРЫТИЙ
А.А. Казакбаева, Е.Г. Комарова 150

ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ И СОСТАВА МИКРОДУГОВЫХ ЛАНТАН-КРЕМНИЙ-СОДЕРЖАЩИХ КАЛЬЦИЙФОСФАТНЫХ ПОКРЫТИЙ
Е.А. Казанцева, Е.Г. Комарова 153

ИССЛЕДОВАНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ, ФАЗОВОГО СОСТАВА И СВОЙСТВ ПОКРЫТИЙ СИСТЕМЫ Al-Si-N, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ МАГНЕТРОННОГО ОСАЖДЕНИЯ
Р.А. Калиева, Е.В. Рыбалко 156

PRECISE RO-VIBRATIONAL ANALYSIS OF VIBRATIONAL BANDS IN 1100-1400 $СМ^{-1}$ REGION OF SPECTRUM OF C_2HD_3
N.V. Kashirina 159

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ХАРАКТЕРИСТИК СЕНСОРОВ H_2 НА ОСНОВЕ ТОНКИХ ПЛЕНОК Pt/Pd/Au/SnO_2:Sb, Ag, Y и Au/SnO_2:Sb, Ag, Y
С.В. Ким, А.В. Алмаев 162

ПОЛУЧЕНИЕ Ni_x/Au_{1-x} НАНОТРУБОК МЕТОДОМ ШАБЛОННОГО СИНТЕЗА
А.Л. Козловский, А.С. Загребова, М.А. Ибрагимова 165

ОБ УЛУЧШЕНИИ ПАРАМЕТРОВ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ МОЛЕКУЛЫ $C_2H_2D_2$ – CIS НА ОСНОВЕ ВЫСОКОТОЧНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ О ПОЛОСАХ ν_{10}, ν_7, $\nu 6$ И ν_3
Ю.В. Конова 168

ПОЛУЧЕНИЕ НАНОРАЗМЕРНОГО ДИОКСИДА КРЕМНИЯ В ПЛАЗМЕ ДУГОВОГО РАЗРЯДА
П.В. Космачев 171

МЕТОДИКА РАСЧЕТА ТЕЧЕНИЙ РАБОЧИХ ТЕЛ В ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ ТРАКТАХ ПВРД
К.В. Костюшин, А.М. Кагенов, В.А. Шувариков 174

ВЛИЯНИЕ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА МИКРОСТРУКТУРУ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА 12%-НОЙ ХРОМИСТОЙ ФЕРРИТНО-МАРТЕНСИТНОЙ СТАЛИ ЭК-181
Д.А. Кравченко, Н.А. Полехина 177

МОДИФИЦИРОВАНИЕ ПЛЕНОК ИЗ ПОЛИМОЛОЧНОЙ КИСЛОТЫ ПЛАЗМОЙ АТМОСФЕРНОГО ДАВЛЕНИЯ
В.Л. Кудрявцева, Э.В. Киблер 180

АНАЛИЗ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ ПОЛОСЫ ν_{11} МОЛЕКУЛЫ $^{13}C_2H_4$
А.В. Кузнецов 183

РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ ТЕЧЕНИЯ ГАЗА В КАНАЛАХ С ШЕРОХОВАТОЙ СТЕНКОЙ
М.А. Кузнецов 186

ЭФФЕКТИВНОСТЬ МЕХАНИЧЕСКИХ ТРЕНИРОВОК ДЛЯ НАВЕДЕНИЯ ДВУСТОРОННЕГО ЭФФЕКТА ПАМЯТИ ФОРМЫ В ГЕТЕРОФАЗНЫХ МОНОКРИСТАЛЛАХ $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$ (ат. %)
Н.Г. Ларченкова, Е.Е. Тимофеева, А.Б. Тохметова 189

КОРРЕКЦИЯ ВКЛАДА ИСТОЧНИКА TI^{44}
А.Д. Ломыгин, К.Д. Уразова, Ю.С. Бордулев 192

МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕНТГЕНОВСКОЙ ТОМОГРАФИИ НА ОСНОВЕ ПРЯМОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ РАДОНА
А.Д. Ломыгин, А.Х. Оздиев 195

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОСТИМУЛИРОВАННОГО ВЫХОДА ВОДОРОДА ИЗ ТИТАНА
Лю Ланьцзэ, В.С. Сыпчеко, Л.И. Семкина 198

ЭЛЕКТРОН-ПОЗИТРОННАЯ АННИГИЛЯЦИЯ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ СТРУКТУРЫ НАНОАЛМАЗОВ ПОСЛЕ ЦИКЛИЧЕСКОЙ СОРБЦИИ ВОДОРОДА
Л.В. Гулидова, Лю Чао 201

ФОРМИРОВАНИЕ БИОИНЕРТНЫХ УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТЫХ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ ТИТАНА, НИОБИЯ И ЦИРКОНИЯ
А. Майрамбекова, Н.К. Ахметова 204

ИССЛЕДОВАНИЕ СТОЛКНОВЕНИЯ ЧАСТИЦЫ, ДВИЖУЩЕЙСЯ В ПОТОКЕ ГАЗА С ТВЕРДОЙ СТЕНКОЙ
Н.А. Мамадраимова, А.В. Андриасян, О.В. Матвиенко 207

ОЦЕНКА ВОЗМОЖНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ЧЕРЕНКОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ДЛЯ ОХЛАЖДЕНИЯ ПРОТОННОГО ПУЧКА ПО ЕГО ЭНЕРГЕТИЧЕСКИМ ПОТЕРЯМ
Ю.С. Маркова 210

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ЭВОЛЮЦИИ НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ В МАТЕРИАЛЕ С ПОКРЫТИЕМ
С.А. Мартынов 213

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ПРОКАТКИ НА СТРУКТУРУ, МЕХАНИЗМЫ ДЕФОРМАЦИИ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СТАЛИ 01Х17Н13М3, ЛЕГИРОВАННОЙ ВОДОРОДОМ
Е.В. Мельников, Г.Г. Майер, В.А. Москвина 216

ВЛИЯНИЕ ХОЛОДНОЙ ПРОКАТКИ НА ЗАКОНОМЕРНОСТИ И МЕХАНИЗМЫ ДЕФОРМАЦИИ, СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛОВ СТАЛИ Fe-28Mn-2.6Al-1.3C
Е.В. Мельников, Г.Г. Майер, В.А. Москвина 219

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА
О. Мендоса, И.Ю. Новоселов 222

МЕТОД ИЗМЕНЕНИЯ СВОЙСТВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ С ИОНИЗИРУЮЩИМ ИЗЛУЧЕНИЕМ
И.А. Милойчикова, М.А. Переверзева, Д.В. Журавлев 225

ТЕКУЩИЙ СТАТУС ПРОЕКТА УСТАНОВКИ НЗТ НА ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОМ ЯДЕРНОМ РЕАКТОРЕ ИРТ-Т
П.А. Молодов, М.Н. Аникин, А.Г. Наймушин 228

ЭЛЕКТРОННО-МИКРОСКОПИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ФАЗОВОГО СОСТАВА ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ ИОННО-АЗОТИРОВАННОЙ АУСТЕНИТНОЙ СТАЛИ
В.А. Москвина, Г.Г. Майер, Е.В. Мельников 231

РАДИАЦИОННО-ПРИВИВОЧНАЯ ПОЛИМЕРИЗАЦИЯ ПЛЕНОК ПОЛИВИНИЛИДЕНТФТОРИДА
М.А. Мысаханов 234

ИЗМЕНЕНИЕ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ АЛЮМИНИЕВЫХ СПЛАВОВ ПРИ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ
А.А. Мякинин 237

ЗАКОНОМЕРНОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ ФРАГМЕНТИРОВАННОЙ СТРУКТУРЫ В МОНОКРИСТАЛЛАХ ГЦК СПЛАВА
Е.Н. Николенко, Т.С. Куницына 240

ВЛИЯНИЕ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА СТРУКТУРНО-ФАЗОВОЕ СОСТОЯНИЕ СТАЛИ СО СТРУКТУРОЙ ОТПУЩЕННОГО МАРТЕНСИТА
А.В. Никоненко, Н.А. Попова, Е.Л. Никоненко, Н.А. Конева 243

ИЗУЧЕНИЕ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В НАНОСТРУКТУРНЫХ ПОКРЫТИЯХ НА ОСНОВЕ Zr-Y-O
А.В. Никоненко, М.П. Калашников, В.В. Нейфельд, М.В. Федорищева 246

ВЛИЯНИЕ СПОСОБА СВАРКИ НА СТРУКТУРУ И ФАЗОВЫЙ СОСТАВ ЗОНЫ ТЕРМИЧЕСКОГО ВЛИЯНИЯ СВАРНОГО ШВА СТАЛИ 09Г2С
Е.А. Ожиганов, Н.А. Попова, Е.Л. Никоненко, А.Н. Смирнов 249

УМЕНЬШЕНИЕ ДОЗЫ ОБЛУЧЕНИЯ ПАЦИЕНТА ПРИ ТОМОГРАФИЧЕСКОМ ИССЛЕДОВАНИИ ПУТЁМ ПРИМЕНЕНИЯ ОПТИМИЗИРОВАННОГО АЛГОРИТМА ОБРАТНОГО ПРОЕЦИРОВАНИЯ
А.Х. Оздиев 252

РЕШЕНИЕ ПРОБЛЕМЫ ТОМОГРАФИЧЕСКОГО СКАНИРОВАНИЯ ОБЪЕКТОВ ДЕТЕКТОРАМИ МАЛОГО РАЗМЕРА
А.Х. Оздиев 255

СТРУКТУРА СУБМИКРОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВОВ Cu – Al
Д.А. Осипов 258

ОРИЕНТАЦИОННАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ТЕРМИЧЕСКОГО И МЕХАНИЧЕСКОГО ГИСТЕРЕЗИСА В МОНОКРИСТАЛЛАХ СПЛАВА $Ni_{51}Fe_{18}Ga_{27}Co_4$
К.С. Осипович 261

КОНТРОЛЬ ЭФФЕКТИВНОСТИ ЭЛЕКТРОПОРАЦИИ С ПОМОЩЬЮ ИЗМЕРЕНИЯ ПРОВОДИМОСТИ ТКАНЕЙ
Ф.А. Пак 264

ВЛИЯНИЕ РАЗМЕРА ЧАСТИЦ НА ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛОВ СПЛАВА НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА FeNiCoAlNb
М.Ю. Панченко 267

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ИСТОЧНИКА ПИТАНИЯ МАГНЕТРОНА НА СВОЙСТВА ПЛЁНОК НИТРИДА КРЕМНИЯ
Ю.В. Петраков, Д.В. Киселева 270

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭКСТРАКЦИИ ВЕЩЕСТВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ИМПУЛЬСНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ
Е.В. Петренко, А.А. Иванов 273

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ И ВЛИЯНИЯ ВНЕШНЕГО ДАВЛЕНИЯ НА ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА СОЕДИНЕНИЙ $A^{II}Mg_2Bi_2$ (A^{II} = Mg, Ca, Sr, Ba)
Е. К. Петров 276

ОРИЕНТАЦИОННАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЭФФЕКТА ПАМЯТИ ФОРМЫ В МОНОКРИСТАЛЛАХ СПЛАВА $Ni_{53}Mn_{25}Ga_{22}$
М.В. Пичкалёва, Е.Е. Тимофеева 279

ВЛИЯНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА МАРТЕНСИТНОЕ ПРЕВРАЩЕНИЕ В МОНОКРИСТАЛЛАХ СПЛАВА НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА
М.Е. Подгорный, И.В. Куксгаузен 282

ВЛИЯНИЕ РАЗМЕРА ДИСПЕРСНЫХ ЧАСТИЦ γ'-ФАЗЫ НА СВЕРХЭЛАСТИЧНОСТЬ В МОНОКРИСТАЛЛАХ СПЛАВА FeNiCoAlTi
В.В. Поклонов, С.Э. Лямкин 285

СТРУКТУРА КОМПОЗИЦИОННЫХ ЛИГАТУР, ПОЛУЧЕННЫХ СВС МЕТОДОМ
В.В. Промахов, А.Е. Матвеев, И.А. Жуков 288

ОСОБЕННОСТИ РЕЛАКСАЦИИ ЗЕРЕННОЙ И ДЕФЕКТНОЙ СТРУКТУРЫ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОГО СПЛАВА V-Cr-ZrO_2
В.Л. Радишевский, И.В. Смирнов, К.В. Гриняев 291

ИЗМЕНЕНИЕ ПОВЕРХНОСТИ ВОЛЬФРАМА ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ВОДОРОДНОЙ ПЛАЗМОЙ
Б.К. Рахадилов 294

ВЛИЯНИЕ БОРА НА МЕХАНИЧЕСКИЕ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА В СПЛАВАХ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА
К.А. Реунова 297

МОДЕЛИРОВАНИЕ НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ СЕГМЕНТА ШЕЙНОГО ОТДЕЛА ПОЗВОНОЧНИКА ПРИ НАКЛОНЕ ВПЕРЕД
Ю.А. Рикун, А.В. Телегина 300

НАНЕСЕНИЕ ПОКРЫТИЯ ZrTiCu НА ЗАЭВТЕКТИЧЕСКИЙ СИЛУМИН (20-22 ВЕС.% Si) ИОННО-ПЛАЗМЕННЫМ МЕТОДОМ
М.Е. Рыгина, Е.А. Петрикова, В.В. Шугуров 303

ПОЛУЧЕНИЕ КОМПОЗИЦИОННОЙ СИСТЕМЫ КАРБИД ЦИРКОНИЯ – УГЛЕРОД (ZrC–C) МЕТОДОМ ГОРЯЧЕГО ПРЕССОВАНИЯ
А.В. Рыгин, Ю.А. Мировой 306

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ ОБРАБОТКИ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА БЫСТРОРЕЖУЩЕЙ СТАЛИ
Ж.Б. Сагдолдина, Б.К. Рахадилов, А.А. Мякинин 309

ПРОВЕРКА УРАВНЕНИЯ СВЯЗИ В МЕТОДЕ ДВУХЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ АБСОРБЦИИ ДЛЯ РАЗЛИЧНЫХ ПАР ЭНЕРГИЙ
А.А. Семоненко 312

ЗАВИСИМОСТИ «НАПРЯЖЕНИЕ-ДЕФОРМАЦИЯ» ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ГЦК СПЛАВОВ И ЭВОЛЮЦИЯ ДИСЛОКАЦИОННОЙ СТРУКТУРЫ
Ю.Е. Сенцова, Л.И. Тришкина, Т.В. Черкасова, Н.А. Конева 315

СРАВНЕНИЕ АЛГОРИТМОВ РАСЧЕТА ПОГЛОЩЕННОЙ ДОЗЫ В СИСТЕМЕ ПЛАНИРОВАНИЯ XIO ДЛЯ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ В КЛИНИЧЕСКОЙ ПРАКТИКЕ
М.А. Синягина, Е.С. Сухих 318

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОРОШКОВОЙ СРЕДЫ НА ХАРАКТЕР РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ В ДВУМЕРНОЙ МОДЕЛИ В ПРОЦЕССАХ ЛАЗЕРНОЙ ОБРАБОТКИ МАТЕРИАЛОВ
П.В. Соболева 321

ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМА РАСПРОСТРАНЕНИЯ НИЗОВОГО ЛЕСНОГО ПОЖАРА С ПОМОЩЬЮ ЧИСЛЕННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА
Э. Сопруненко 324

ВЛИЯНИЕ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА ЭФФЕКТ ПАМЯТИ ФОРМЫ В КРИСТАЛЛАХ СПЛАВА $Ni_{50,2}Ti_{37,3}Hf_{12,5}$
Н.Ю. Суриков, А.И. Тагильцев 327

ИССЛЕДОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ КЛИНИЧЕСКОГО ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА В ТКАНЕЭКВИВАЛЕНТНОЙ СРЕДЕ ДЛЯ ТЕРАПЕВТИЧЕСКИХ УСКОРИТЕЛЕЙ РАЗНОГО ТИПА
Я.Н. Сутыгина, Е.С. Сухих 330

ПОЛЯ НАПРЯЖЕНИЙ И ЭНЕРГИИ ДЕФЕКТОВ ДИСКЛИНАЦИОННОГО ТИПА В ЗОНАХ ЛОКАЛИЗАЦИИ УПРУГИХ ДИСТОРСИЙ
И.И. Суханов 333

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ПОТЕРИ В НАВОДОРОЖЕННОМ ТИТАНЕ ВТ1-0 ПРИ РАСПРОСТРАНЕНИИ В НЕМ ВИХРЕВЫХ ТОКОВ
Сюй Шупэн 336

ГАЗОФАЗНОЕ ГИДРИРОВАНИЕ ЦИРКОНИЕВОГО СПЛАВА Э110 ДО РАЗЛИЧНЫХ КОНЦЕНТРАЦИЙ ВОДОРОДА С РАВНОМЕРНЫМ РАСПЕРДЕЛЕНИЕМ
Сюэ Юйхан 339

ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА МОНО- И ПОЛИКРИСТАЛЛОВ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СПЛАВА $NI_{50,3}TI_{32,2}HF_{17,5}$
А.И. Тагильцев, Н.Г. Ларченкова 342

АНАЛИЗ МЕХАНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ГРАДИЕНТНЫХ СКАФФОЛДОВ, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ ПЛАВКИ
М.С. Ткачев, Е.А. Чудинова, Е.С. Мельников 345

СНИЖЕНИЕ ПОТЕРЬ В ИМПУЛЬСНОМ ТРАНСФОРМАТОРЕ СИСТЕМЫ ИНЖЕКЦИИ БЕТАТРОНА
А.П. Шестак, Н. Ж. Тойбаев 348

ТЕРМОУПРУГИЕ МАРТЕНСИТНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ ПОД НАГРУЗКОЙ В [011]-МОНОКРИСТАЛЛАХ СПЛАВА $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$ ПОД ДЕЙСТВИЕМ РАСТЯГИВАЮЩИХ И СЖИМАЮЩИХ НАПРЯЖЕНИЙ
А.Б. Тохметова, Н.Г. Ларченкова, Е.Е. Тимофеева 351

ОСОБЕННОСТИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ МЕХАНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК МЕТОДОМ НАНОИНДЕНТИРОВАНИЯ МАТЕРИАЛОВ, ПОЛУЧЕННЫХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ
Д.А. Турлыкожаева 354

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРИМЕНИМОСТИ ТВЕРДОТЕЛЬНОГО ФАНТОМА SP34 ДЛЯ ОРТОВОЛЬТНОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ
О.В. Тхорик, Е.С. Сухих 357

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ПРОЦЕССА МИКРОДУГОВОГО ОКСИДИРОВАНИЯ НА СВОЙСТВА АНТИБАКТЕРИАЛЬНЫХ СЕРЕБРОСОДЕРЖАЩИХ КАЛЬЦИЙФОСФАТНЫХ ПОКРЫТИЙ
А.В. Угодчикова 360

КОНЦЕНТРАЦИОННЫЕ И ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ТЕПЛОЕМКОСТИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ С ПРИМЕСЯМИ ПЕРЕХОДНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ
В.А. Улитко 363

АТОМНАЯ СТРУКТУРА СИСТЕМЫ НИКЕЛЬ–ВОДОРОД ПРИ РАЗЛИЧНОЙ КОНЦЕНТРАЦИИ ВОДОРОДА
У Мэняо 366

РАСПРЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ В СИСТЕМЕ НИКЕЛЬ–ВОДОРОД
У Мэняо 369

АНАЛИЗ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ ПОЛОС ν_2, ν_3, ν_{12} ИЗОТОПОЛОГА ЭТИЛЕНА $^{12}C^{13}CH_4$
Л.Е. Федотов 372

ТРИБОЛОГИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПЭТФ ТРЕКОВЫХ МЕМБРАН ПРИ СУХОМ ТРЕНИИ СКОЛЬЖЕНИЯ
Е.О. Филиппова, А.В. Филиппов 375

СТРУКТУРНАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ КОМПЛЕКСА ВОДОРОД-ВАКАНСИЯ В α-ТИТАНЕ: РАСЧЕТЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ
М.Г. Фомин 378

ОПТИМИЗАЦИЯ ТОЛЩИНЫ ВОДОРОДОНЕПРОНИЦАЕМЫХ ПОКРЫТИЙ НА ОСНОВЕ НИТРИДА ТИТАНА
Фу Сияо 381

СОЗДАНИЕ МОДЕЛИ ФОТОННОГО ПУЧКА ТЕРАПЕВТИЧЕСКОГО ЛИНЕЙНОГО УСКОРИТЕЛЯ ELEKTA SYNERGY В СИСТЕМЕ ПЛАНИРОВАНИЯ PLUNC
И.Ж. Хасенова, Е.С. Сухих 384

ВЛИЯНИЕ КАВИТАЦИИ НА ДИСКОВЫЙ ЗАВИХРИТЕЛЬ ДЛЯ ПЕРЕМЕШИВАНИЯ РАСПЛАВЛЕННОГО АЛЮМИНИЯ И ЧАСТИЦ МОДИФИКАТОРА
М.Г. Хмелева, А.Б. Тохметова 387

РАСЧЕТ УПРУГИХ СВОЙСТВ PdH МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКЕ
Цзи Вэньян 390

ВЛИЯНИЕ ВОДОРОДА НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТИТАНОВОГО СПЛАВА
Цзян Синьмин 393

ОПРЕДЕЛЕНИЕ РАВНОМЕРНОСТИ ТОЛЩИНЫ НИКЕЛЕВЫХ ПОКРЫТИЙ, НАНЕСЕННЫХ НА ЦИРКОНИЕВЫЕ СПЛАВЫ МЕТОДОМ МАГНЕТРОННОГО РАСПЫЛЕНИЯ
Цяо Цзинвэнь 396

СИНТЕЗ ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ-НАКОПИТЕЛЕЙ ВОДОРОДА НА ОСНОВЕ TI-CR В ПЛАЗМЕ АНОМАЛЬНОГО ТЛЕЮЩЕГО РАЗРЯДА
Чан Ван Туан, Т.Л. Мурашкина 399

РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМА И СОЗДАНИЕ ПАКЕТА ПРОГРАММ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ МОЛЕКУЛЫ ТИПА СФЕРИЧЕСКОГО ВОЛЧКА: ОПРЕДЕЛЕНИЕ НЕПРИВОДИМЫХ ВРАЩАТЕЛЬНЫХ ОПЕРАТОРОВ
Чан СюаньХао 402

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ДИФФУЗИИ ВОДОРОДА В ПАЛЛАДИИ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ
Чан Тхи Ми Хуэ 405

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЗИТРОННОЙ АННИГИЛЯЦИИ С ПРИМЕНЕНИЕМ ИСТОЧНИКА ПОЗИТРОНОВ 64Cu
В. Чэнь, Ю.С. Бордулев 408

ПОЛУЧЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ГИБРИДНЫХ БИОКОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ НАНОТРУБОК ДИОКСИДА ТИТАНА, НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА И КАЛЬЦИЙ ФОСФАТНЫХ НАНОЧАСТИЦ
Р.В. Чернозем 411

ВОДОРОДОПРОНИЦАЕМОСТЬ ПОКРЫТИЙ НИТРИДА ТИТАНА, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ВАКУУМНО-ДУГОВОГО ОСАЖДЕНИЯ
Чжан Ле, А.Н. Сутыгина, Е.Б. Кашкаров 414

РАСЧЁТ ПОГЛОЩЁННОЙ ДОЗ ИОНИЗИРУЮЩЕГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ПЛЕНКОЙ ПВДФ
Чжан Юй 417

АНАЛИЗ СПЕКТРА ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ МОЛЕКУЛЫ $^{32}S^{16}O^{18}O$ В ДИАПАЗОНЕ 1550 – 1950 $СМ^{-1}$
Фанцэ Чжан 420

АНАЛИЗ МИКРОСТРУКТУРЫ ПЛЕНОК НА ОСНОВЕ ОКСИНИТРИДОВ ТИТАНА, ОСАЖДЕННЫХ МЕТОДОМ РЕАКТИВНОГО МАГНЕТРОННОГО РАСПЫЛЕНИЯ
Сунь Чжилэй, М.Е. Конищев, А.А. Пустовалова 423

ИЗМЕРЕНИЕ ЭНЕРГИИ АКТИВАЦИИ ВОДОРОДА В ТИТАНОВОМ СПЛАВЕ ВТ1-0 МЕТОДОМ ТЕРМОЭДС
Чжоу Хао 426

МИГРАЦИЯ ВОДОРОДА В ТИТАНЕ. ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ
Чжу Ибо, Сюй Шупэн 429

ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ НАНОДИСПЕРСНОГО W ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙТСВ Al-Si СПЛАВОВ
А.В. Чумаевский, Н.В. Мартюшев 432

СТРУКТУРНО-ФАЗОВОЕ СОСТОЯНИЕ Al-Si СПЛАВОВ ПРИ МОДИФИЦИРОВАНИИ НАНОДИСПЕРСНЫМ ПОРОШКОМ W
А.В. Чумаевский, Н.В. Мартюшев 435

РАЗМЕРНЫЕ ЭФФЕКТЫ В БИНАРНЫХ СПЛАВАХ СТЕХИОМЕТРИЧЕСКИХ СОСТАВОВ АВ И A_3B
С.А. Шалыгин, Н.О. Солоницина, И.А. Рахманова 438

ПОВЫШЕНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ И ТРИБОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ТЕХНИЧЕСКИ ЧИСТОГО АЛЮМИНИЯ, ПОДВЕРГНУТОГО КОМБИНИРОВАННОЙ ОБРАБОТКЕ
А.Р. Шамиева, А.Д. Тересов 441

СПОСОБЫ ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ИМПЛАНТАТОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА
А.А. Шаронова, М.А. Сурменева 444

ПРЕИМУЩЕСТВЕННАЯ ОРИЕНТАЦИЯ И ДЕФЕКТНОЕ СТРОЕНИЕ γ′- ФАЗЫ В СПЛАВЕ НА ОСНОВЕ Ni-Al-Cr, ЛЕГИРОВАННОГО ЛАНТАНОМ
Л.Ф. Шергаева, Н.А. Попова, Н.Р. Сизоненко, Е.Л. Никоненко 447

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ЛЕСНЫХ ГОРЮЧИХ МАТЕРИАЛОВ ПРИ ОЦЕНКЕ СКОРОСТИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ИМПУЛЬСА ТЕПЛА В ТОЛЩЕ ОБРАЗЦА
Н.Е. Шлегель, Т.Р. Валиуллин, В.А. Кириенко 450

ВЫХОД ВОДОРОДА ИЗ МЕТАЛЛОВ ПРИ ТЕРМИЧЕСКОМ И РАДИАЦИОННОМ НАГРЕВЕ
Юань Цзэюй, В.С. Сыпченко, Н.Д. Толмачева 453

ДОЗИМЕТРИЯ НЕЙТРОННЫХ ПОЛЕЙ ТЕРАПЕВТИЧЕСКОГО КОМПЛЕКСА НА БАЗЕ ЦИКЛОТРОНА У-120
А.Д. Южаков 456

СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СТАЛИ 20Х13, ОБРАБОТАННОЙ ВЫСОКОИНТЕНСИВНЫМ ИМПУЛЬСНЫМ ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ
М.С Ямпольский1, А.А. Клопотов 459

АНАЛИЗ СПЕКТРОВ ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ ПОЛОС $2\nu_1$, $\nu_1 + \nu_3$ И $2\nu_3$ МОЛЕКУЛЫ $^{32}S^{16}O^{18}O$
Ян Иншу 462

INVESTIGATION OF THE 3-D POLYMER SCAFFOLDS WITH MINERALIZED SURFACE FOR TISSUE ENGINEERING VIA ELECTROSPINNING TECHNOLOGY

R.V. Chernozem

Scientific Supervisor: Dr. R.A. Surmenev

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

E-mail: romanchernozem@gmail.com

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЛОКНИСТЫХ 3-Д ПОЛИМЕРНЫХ СКЭФФОЛДОВ ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОФОРМИРОВАНИЯ С МИНЕРАЛИЗОВАНОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ ВОЛОКОН ДЛЯ КОСТНОЙ ИНЖЕНЕРИИ

Р.В. Чернозем

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

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: romanchernozem@gmail.com

Аннотация. *В настоящей работе приведены результаты получения нетканых волокнистых трехмерных скэффолдов на основе полигидроксибутирата или полигидроксибутират-гидроксивалерата с минерализованной поверхностью волокон по всему объему скэффолда, и исследования их морфологии, химического состава и структуры. Скэффолды были получены методом электроформирования при скорости вращения коллектора 1200 или 600 об/мин. Для получения полностью покрытых волокон по всему объему скэффолда частицами карбоната кальция использовалась ультразвуковая обработка в растворах хлористого кальция и карбоната натрия. Осуществлялся контроль массы образцов до и после каждой обработки. Для исследования морфологии скэффолдов использовалась сканирующая электронная микроскопия. Для исследования структуры и химического состава образцов использовались рентгеновский фазовый анализ и энергодисперсионная рентгеновская спектроскопия, соответственно.*

Introduction. Manufacturing of implants with predetermined architectonics and individually optimized functionality is one of the most important challenges today. 3D scaffolds of polymers can be used for bone tissue engineering. Electrospinning is the most broadly used technique and allows obtaining the most promising results for different tissue engineering applications [1]. Polyhydroxyalkanoates (PHAs) are the most prospective class of materials that possess good biocompatibility as well as physical and mechanical properties that are similar to that of the hard tissue in the human body. Compared with other PHAs, poly(hydroxybutyrate) (PHB) and poly(hydroxybutyrate-co-hydroxyvalerate) (PHBV) of a natural origin are simultaneously degradable and piezoelectric, which might promote bone growth *in vivo* [2]. Normally, cell affinity toward polymers is poor as a result of their low hydrophilicity and lack of surface cell recognition sites [3]. A tendency in technological development of implantable materials is to functionalize of bio-constructions. Fibers with $CaCO_3$ can be successfully used in bone tissue repair and substitution [4]. To our knowledge, a study of the 3-D scaffolds from PHB and PHBV with different structure and with $CaCO_3$ coatings has not been reported yet. The objective of

this project is to fabricate and investigate the morphology, chemical composition and structure of electrospun 3-D fiber PHBV and PHB scaffolds with mineralized surface via biomimetic coating for biomedical application.

Materials and methods. The fabrication of scaffolds involved the dissolution of poly[(R)3-hydroxybutyrate] and poly[3-hydroxybutyrate-co-3-hydroxyvalerate] powders in chloroform ($CHCl_3$). A collector was rotated at 600 and 1200 rotation per minute (rpm). The mineralization of PHB and PHBV scaffolds was carried out using a typical process of $CaCO_3$ particles crystallization from a mixture of Na_2CO_3 and $CaCl_2$ solutions (1 M). PBH and PHBV scaffolds were soaked in 1 ml of $CaCl_2$ and 1 ml of Na_2CO_3 solutions. This system was subjected to ultrasound for 30 sec. After treatment the treated scaffolds were washed and dried at 55 °C for 60 min. The SEM investigations were carried out with an ESEM Quanta 400 FEG instrument equipped with an energy-dispersive X-ray analysis (EDX; EDS analysis system Genesis 4000, SUTW-Si(Li) detector) operated in a high vacuum. X-ray diffraction analysis (XRD) of prepared samples was performed using a D8 Advance Bruker equipped with a Cu anode.

Results and discussion. Fig. 1 shows the SEM images of PHBV and PHB scaffolds prepared at different rotation speed of the collector. Successful fabrication of electrospun scaffolds without any beads was observed. The average diameter of PHBV and PHB scaffolds fibrous prepared at the 1200 rpm was 6.1±1.9 μm and 4.3±1.0 μm, respectively, at the 600 rpm was 7.6±2.7 μm and 4.6±1.2 μm, respectively. From the Fig.1, the morphology of the scaffolds has become more oriented along the longitudinal axis, which resulted in a more aligned structure of the scaffolds, which was in accordance with the results reported elsewhere [5].

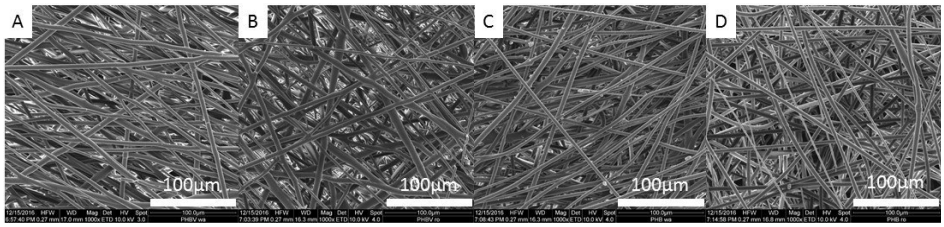


Fig. 1. SEM images of 3-D PHBV (a,c) and PHB (b,d) scaffolds prepared at the rotation speed of the collector of 1200 (a,c) and 600 rpm (b,d)

Fig. 2 represents SEM images of the scaffolds treated 3 times to attain uniform coatings of calcium carbonate throughout the scaffold. The ultrasonic treatment provides the penetration of solutions into pores and interior of the fibrous material, which facilitates the homogenous mineralization of the scaffold [4]. The EDX analysis resulted in the presence of Ca, C, O, Na and Cl.

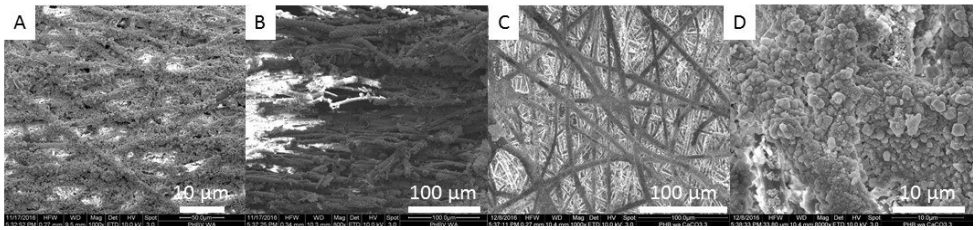


Fig. 2. SEM images of 3-D PHBV (a,b) and PHB (c,d) scaffolds prepared at the rotation speed of the collector of 1200 rpm: A,C – top views, B,D – side views

The increase of the mass after each treatment, independence of the polymer and morphology, were observed, as shown in the Fig.3a. Fig. 3b represents XRD patterns of the treated and untreated scaffolds. The peaks

correspond to calcite rhombohedra (№ 01-072-1652 PDF 4+ ICDD) and NaCl (№ 00-05-0628 PDF 4+ ICDD) were observed after three treatment procedures of the scaffolds.

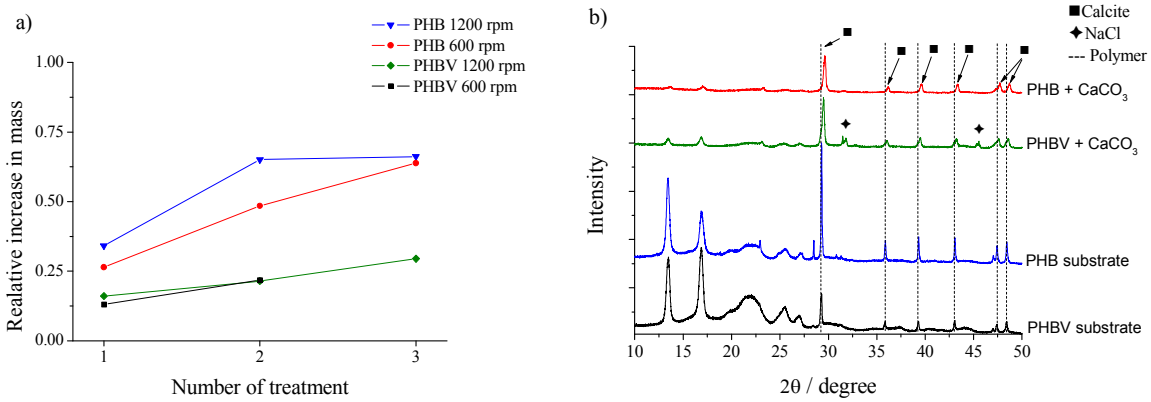


Fig. 3. Dependence of the relative increase in mass from the number of treatments (a), and XRD patterns (b) of scaffolds before and after three treatment procedures.

Conclusion. The PHBV and PHB scaffolds were successfully prepared via electrospinning with two different rotation speeds of the collector, which allows changing fiber size distribution and scaffolds structure. The ultrasound treatment in Na_2CO_3 and $CaCl_2$ solutions allows preparing uniform coated scaffolds with calcium carbonate via 3 times repetition of the treatment procedure, independently of the used polymer. However, at the same treatment conditions, the relative increase in mass for PHB scaffolds after each treatment procedure was significantly larger than that of PHBV scaffolds. The mechanical behavior, wettability, piezoelectric activity and biological response of scaffolds with mineralized fibers will be investigated in the future.

Acknowledgements. The authors are thankful to Prof. M. Epple, Dr. Kateryna Loza and Dr. Oleg Prymak, University of Duisburg-Essen, Germany, for the assistance with SEM and XRD measurements. This study was supported by the Federal Target Program #14.587.21.0013 (a unique application number 2015-14-588-0002-5599), President's fellowships MK-7907.2016.8, MK-6459.2016.8, and 11.1233.2017/PCH.

REFERENCES

1. Bhardwaj, N. and S.C. Kundu, (2010) Electrospinning: a fascinating fiber fabrication technique. Biotechnology advances, no 28(3): pp. 325-347.
2. Braghirolli, D.I., D. Steffens, and P. Pranke (2014) Electrospinning for regenerative medicine: a review of the main topics. Drug discovery today, no 19(6): pp. 743-753.
3. Masaeli, E., et al., (2014) Peptide functionalized polyhydroxyalkanoate nanofibrous scaffolds enhance Schwann cells activity. Nanomedicine: nanotechnology, biology and medicine, no 10(7), pp. 1559-1569.
4. Savelyeva, M.S., et al. (2017) Vaterite coatings on electrospun polymeric fibers for biomedical applications. Journal of Biomedical Materials Research Part A, no 105(1), pp. 94-103.
5. Gorodzha, S., M. Surmeneva, and R. Surmenev (2015) Fabrication and characterization of polycaprolactone cross-linked and highly-aligned 3-D artificial scaffolds for bone tissue regeneration via electrospinning technology. in IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. IOP Publishing.

RESEARCH OF X-RAY TUBE ENERGY CHARACTERISTICS

A.A. Baulin, E.S. Sukhih, L.G. Sukhih

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

Language adviser: Associate Prof., Yu. Yu. Veber

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

E-mail: baylin1991@tpu.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК РЕНТГЕНОВСКОЙ ТРУБКИ

А.А. Баулин, Е.С. Сухих, Л.Г. Сухих

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

Языковой консультант: доцент, к.пед.н., Ю.Ю. Вебер

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

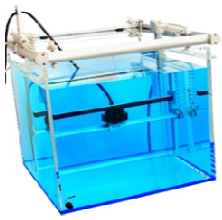
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: baylin1991@tpu.ru

Аннотация. *В настоящей работе приведены результаты исследования энергетических характеристик рентгеновской трубки Xstrahl300 путем моделирования процесса переноса тормозного излучения методом Монте-Карло, на котором основаны алгоритмы расчёта программы PC LAB. Показана возможность оценки распределения поглощенной дозы в различных точках координат водного фантома используя математическую модель. Таким образом, могут быть найдены оптимальные условия эксплуатации рентгеновской трубки в лучевой терапии при различных локализациях. Кроме того, математическая модель рентгеновского излучения способна моделировать ожидаемую эффективность проводимой терапии и относительную биологическую эффективность, используя теоретические модели.*

Introduction. Research on modification of radiotherapy methods using agents introduced into the tumor is being carried out in many countries in order to increase the relative biological effectiveness (RBE) therapy[1]. It has been shown [2,3] that with the introduction of heavier elements with an atomic number $Z \geq 53$ into the tissue, the energy release increases. The most frequently used elements are radiosensitizers, chemotherapeutic agents, and nanoparticles of platinum and gold [2,3,4]. A special attention should be given to the theory of photon-capture interaction [1]. The interaction between photons and nuclei of heavy elements ($Z \geq 53$) results in a generation of a large number of the characteristic X-rays and low-energy auger electrons. This secondary low-energy radiation ionizes nearby atoms and leads to the occurrence of series of highly active radicals, which causes the destruction of the macromolecules of DNA and RNA, proteins, cells, and other structures. If the agent is introduced into the tumor cell (cell nucleus or other tissues and organs), the process may significantly increase the likelihood of death of the tumor cell. The study of X-ray tube energy characteristics will allow creating mathematical models that will calculate the spectra of photons and the dose distribution at various points in the water phantom. Thus, the optimal conditions of using an X-ray tube for different locations can be selected. This work aims to examine energy characteristics of radiotherapeutic apparatus Xstrahl300 by creating a model bremsstrahlung transfer on the Monte Carlo method with the purpose of further evaluation of the photon-capture interactions.

Materials and methods. The important part of this research is the use of an X-ray tube, which generates orthovoltage photons with a sufficiently high dose rate. The Tomsk Regional Oncology Center has an X-ray tube Xstrahl300 (fig. 1a), which allows producing bremsstrahlung in the tube voltage range from 60 to 300 kV.



a) system Xstrahl300 b) dosimetry Dose-1 c) FC65-G d) Blue Phantom

Fig. 1. The radiotherapeutic system Xstrahl300 and equipment for dosimetry

The system Xstrahl300 has applicators, which form the radiation field. Therapeutic applicators are made from copper and have tips made from perspex for visual control. Filters are used to absorb low-energy spectrum of photons, thereby reducing the radiation dose to human skin. Filters are constructed of metals of different thicknesses giving in total a thickness of the half-attenuation layer (HAL) for a certain energy bremsstrahlung. The clinical dosimetry Dose-1 (fig. 1b) was used as a measuring device. The device in conjunction with the ionization chamber FC65-G (fig.1c) was used for accurate measurement of the absolute doses in accordance with the recommendations of IAEA #398. All measurements were carried out in a water phantom Blue Phantom (fig.1d). It is common knowledge that water is the reference standard for clinical dosimetry, since water density corresponds to the density of human tissues and organs. In compliance with the international dosimetry protocols TG-61[5] and the TRS-398[6], calculation of the absorbed dose in water DW, Q is carried out relying on the data measured by the ionization chamber, and is defined as follows:

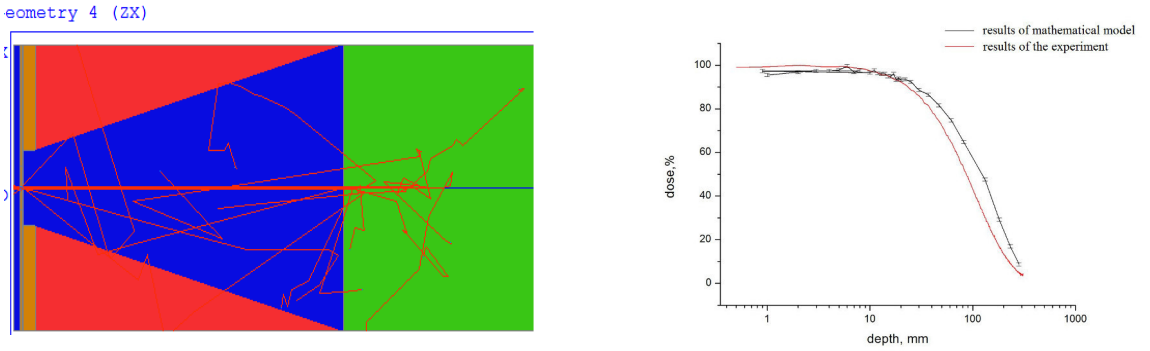
$$D_{W,Q} = M_q \times N_{D,W,Q_o} \times k_{Q,Q_o} \quad (1)$$

where M_q - is the reading of the dosimeter with the reference point of the chamber positioned at z_{ref} in accordance with the reference conditions, and corrected with regard to the influence of such quantities as temperature and pressure, polarity, and electrometer calibration, C; N_{D,w,Q_o} - is the calibration factor in terms of absorbed dose to water for the dosimeter at the reference quality Qo; k_{Q,Q_o} - is a chamber specific factor, which corrects differences between the reference beam quality Qo and the actual beam quality being used, Q.

Modeling of the process of bremsstrahlung transfer to water was performed using the program «Computer Lab» (PCLab) version 9.7.[7], which is based on software package EPHCA (electron-photon cascade) and designed for modeling of processes of propagation of electrons, positrons, protons, and photons using the Monte Carlo method.

Results and discussion. The distribution of absorbed dose in depth in the water phantom was measured in increments of 1 mm. Absorbed doses in the water phantom points using the formula (1) were calculated. The model was created taking into account the precise geometrical parameters of the system Xstrahl300 (fig. 2a). The barriers and filters, which overcome the bremsstrahlung on the way to the main absorber (phantom), were taken into account in this research. As a result, any additional error results of the mathematical model were avoided. Figure 2b is a graph comparing the experimentally measured results with results of the theoretical model of

absorbed dose values. The data analysis shows that the values of the absorbed dose turned to be practically the same in the field of maximum energy transfer. Maximum energy transfer was found at a depth of about 6 mm (99,6% ± 0,74% dose) for mathematical model results and 5.9mm (99,6% ± 2% dose) for experimental results correspondingly. The discrepancy between the experimental and theoretical values of absorbed dose increases in progress passing bremsstrahlung in the water phantom. This occurs due to the contribution of scattered radiation, which was not taken into account in the theoretical model.



a) geometry of the mathematical model b) the distribution of the absorbed dose in the depth of the phantom

Fig. 2. Results of experiment

The obtained results can be considered quite acceptable for the description of the interaction processes of bremsstrahlung generated by the X-ray tube. Thus, the optimal X-ray tube operating conditions (in terms of the photoelectric effect in the contrast agents) for different locations can be found. In addition, mathematical models of the X-ray enable us to simulate the expected effectiveness of the therapy and the RBE using theoretical models.

REFERENCES

1. Apanasevich, V.I., Lukyanov, P.A., Lagureva, A.V., et al. (November, 2014). Method of photon-capture therapy of tumors. SBE IHPE PSMU Russian Ministry of Health. RU2533267(13)C1. Retrieved March 2017, from http://www.ntpo.com/patents_medicine.html
2. Sanche, L. (November 2016). Interaction of low energy electrons with DNA: Applications to cancer radiation therapy. Radiation Physics and Chemistry, no. 128, pp. 36–43.
3. Bayart, E., Pouzoulet, F., Calmels, L., et al. (January 2017). Enhancement of IUdR Radiosensitization by Low-Energy Photons Results from Increased and Persistent DNA Damage. PLOS ONE, pp. 1–17.
4. Kassis AI. (September 2008). Therapeutic Radionuclides: Biophysical and Radiobiologic Principles. Seminars in Nuclear Medicine, no. 38(5), pp. 358–366.
5. Andreo, P., Burns, D.T., Hohlfeld, K., et al. (2000). IAEA, Absorbed Dose Determination in External Beam Radiotherapy. An International Code of Practice for Dosimetry Based on Standards of Absorbed Dose to Water. Technical Report Series no. 398, pp. 251.
6. Chair, C.M., Coffey, C. W., DeWerd, L. A., et al. (2001). AAPM's TG-61 protocol for kilovoltage x-ray beam dosimetry. Medical Physics, no. 28(6), pp. 868– 893.
7. Bespalov, V.I. (2015). Program Guide "Computer laboratory" (Version 9.7). Publishing TPU, pp. 118.

INFLUENCE OF HEATING TEMPERATURE ON THE ALUMINUM USED FOR ELECTRIC CABLES

L. Fellah[1*], A. Diha[2]

Scientific Supervisor: Prof., Dr. Z. Boumerzoug[3]

[1]Department of Earth and Universe Sciences/ University of Kasdi Merbah, 30000 Ouargla, Algeria

[2]Department of mechanic/ University sheik Larbi Tébessi/ Tébessa, 12000, Algeria

[3]LMSM, Department of Mechanical Engineering/ University of Biskra, 07000 Biskra, Algeria

[*]E-mail : fellahcene@yahoo.fr

Abstract. *In this study, we present the effects of temperature rise on microstructural evolution of industrial Al wire. This material is used to manufacture electric cables. For the X-ray analysis of the line profile (LPA), we have chosen the so-called «breadth method» whose basic principle is to draw the Williamson-Hall plot. We have observed that the increase in temperature causes the increasing of coherent diffraction domains (crystallites) size, interplanar distance and cell parameter. There is an expansion of the unit cell. XRD patterns refinement were performed using the whole powder pattern modelling procedure implemented in PM2k software.*

Introduction. The usage on large scale of industrial aluminum for electric cables is justified by mechanical, chemical and physical characteristics of this material. ENICA-Biskra Company uses industrial aluminum in manufacture of electric cables. In this paper, thermal stress effect and its impact on industrial aluminum wires were investigated systematically by XRD techniques. Based on known material properties, lattice parameter, interplanar distance, coherent diffraction domain (crystallite) size, and strain were calculated using Line Profile Analysis (LPA) analyses. Williamson-Hall analysis method was used to study the contributions of crystallite sizes and lattice strain on the peak broadening of the material. We have performed the X-ray diffraction patterns refinement using the recently proposed numerical fitting procedure, the whole powder pattern modelling (WPPM) implemented in PM2k software package [1].

Experimental procedures. The material investigated in this study is an industrial aluminum (99.80 wt. %). which used in the cable factory to produce electric wires for different purposes (eg. cables). The samples studied were taken directly from the production line of the factory. The samples were cut from a wire rod of 9.5 mm diameter, it had a parallelepipedic shape (10×6×3 mm). For the characterization, the samples were polishedusing a mechanical polishing machine of type "MECAPOL P 220 S" with abrasive paper of different particle sizes (number of paper from 80 to 1200) and finished with addition of lubricant and diamond paste. The diffractograms were carried out from flat polished surfaces of samples by X'Pert Philips (Panalytical) X-ray diffractometer equipped witha furnace.

Theoretical overview. During mechanical or thermal treatment of a metal and its alloys, the microstructural parameters of the material change. Dislocations density, stacking fault probability, strain and crystallite size increase or decrease according to conditions of this treatment. X-rays can be used to assess the crystallite size and strain from the line profile of one (or more) peak(s). The particle size broadening to obey the Scherrer law [2]: $\beta_S=K\lambda/D\cos\theta$, where λ is the X-ray wavelength and D is a mean linear dimension of the particle.Strain-induced broadening arising from crystal imperfections and distortion are related by equation: $\beta_d=$ $=4\varepsilon\tan\theta$.

The assumption of the Williamson–Hall method is that the whole line broadening β_{hkl} of sample is a sum of the line broadeningβ_S connected to the crystallite size and the line broadeningβ_d connected to the lattice strain, according to Equation [3]: $\beta_{hkl} = \beta_S + \beta_d$, where β_{hkl} is the total integral breadth, β_S and β_d are, respectively, the integral breadth components for size and strain. The classical Williamson-Hall plot [3, 4] $\beta_{hkl}.\cos\theta$ versus $\sin\theta$ provides estimated values for the apparent crystallite size <D> and the upper limit for the lattice strain (ε) from the intercept and slope, respectively: $\beta_{hkl}.\cos\theta = K\lambda/D + 4\varepsilon\sin\theta$.

Experimental results and discussion. XRD analysis. The XRD diffractogram of the studied sample before the investigation is shown in Fig. 1. We found the peaks characteristic of Al, namely the peaks (111), (200), (220), (311), (222), (400), (331) and (420), in accordance with the Aluminum ASTM sheet. The lattice parameters of the sample (as received) are summarized in Table 1. Fig. 2 shows a shift of the peaks towards the small angles and their broadening as the temperature increases. This has been interpreted by the expansion of the volume of the elementary cell and the introduction of distortions in the crystal lattice of material.

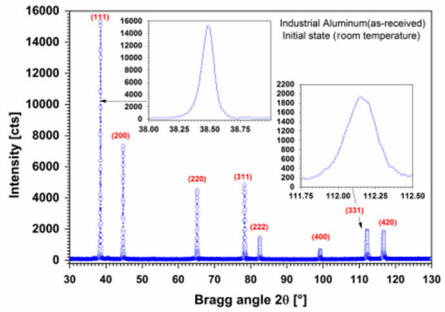


Fig. 1. X-ray pattern of industrial aluminum (as received) at room temperature

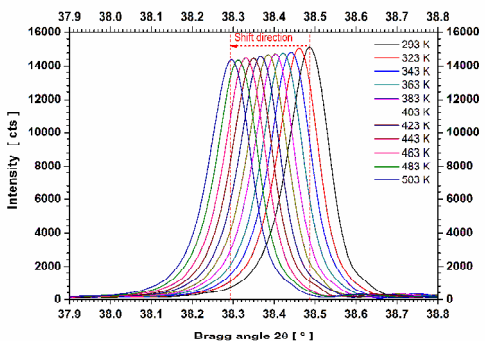


Fig. 2. X-ray profiles comparison of (111)peaks in industrial aluminum samples heated at constant rate

Williamson-Hall method. LPA graphical results are shown in Fig. 3 for industrial aluminum heated from ambient temperature to 503 K (e.g. at (a) 343 K and at (b) 443 K). Experimental data (blue circles) are reported together with the refined data (red line) and the residual (black line below). The agreement between the experimental and refined patterns, as shown by the residual (the difference between the experimental and refined data), is quite satisfactory. The values obtained for the agreement factors from the LPA refinement are in the range of: Rwp = 5.25 ~ 6.94 %, Rexp = 4.15 ~ 12.81 %, and the goodness of fit factor: χ^2 = 1.15~ 1.76.

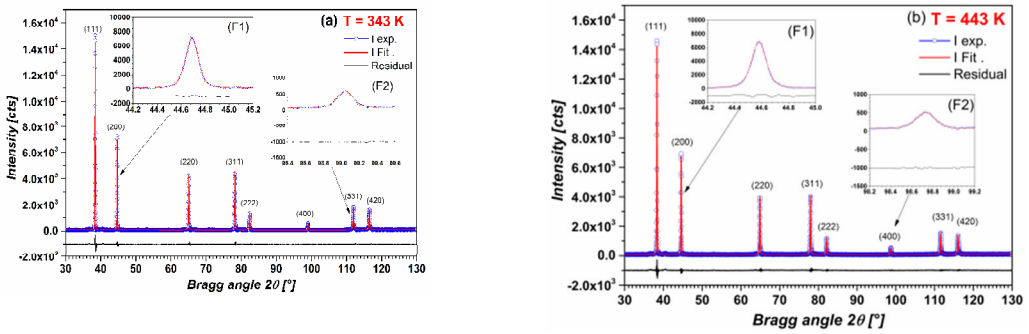


Fig. 3. Graphical ouput of LPA is for industrial Almeasured at (a) 343 K, and (b) 443 K respectively

Fig. 4 shows the Williamson-Hall plots of industrial aluminum studied at 343 K and 443 K. The crystallite size and the strain were calculated from the values of the intersection with the ordinate axis and the slope of the fitted line, respectively.

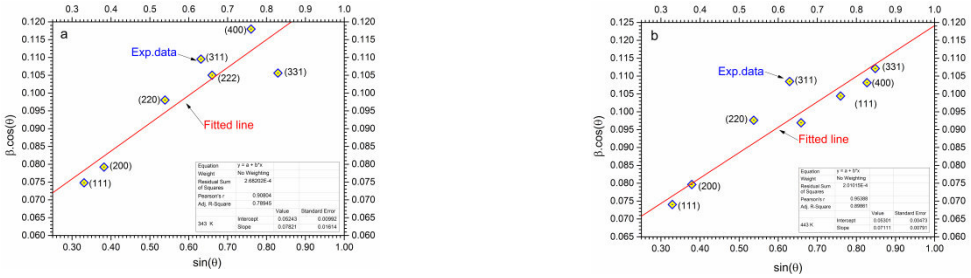


Fig. 4. W-H plots of industrial aluminum correspond to (a) 343 K and (b) 443 K, temperatures respectively

Table 1 summarizes the LPA refinement results. On one hand, we noted that the size of coherent diffraction domains (crystallites)increases with the temperature rise; on an other hand the strain fluctuates between two limits 36.9×10^{-5} and 71.0×10^{-5}. The external contribution of a quantity of energy in thermal form increases individual kinetic energy of the atoms; the atoms vibrate more and the interatomic distances increase. Therefore, the interplanar spacing grow, there is an effect of expanding the crystal lattice. The lattice parameter and unit cell volume increase [5, 6].

Table 1

Summary of microstructural parameters obtained by LPA refinement and by W-H plots

T [K]	**293**	**323**	**343**	**363**	**383**	**423**	**443**	**463**	**483**	**503**
a [nm]	0.40469	0.40496	0.40515	0.40534	0.40555	0.40590	0.40609	0.40627	0.40646	0.40664
d_{hkl} [nm]	0.23375	0.23390	0.23401	0.23412	0.23424	0.23445	0.23455	0.23466	0.23477	0.23487
D [nm]	547	609	815	823	943	1371	2671	3128	3215	3385
$\varepsilon\times10^{-5}$	71.0	45.1	63.9	36.9	68.2	63.3	63.8	56.3	64.9	58.8

Conclusion. This study represents a contribution to the investigation of thermal effect on the microstructure properties of industrial aluminum for the manufacture of electric cables. For the X-ray analysis of the profile of the line, we have chosen the so-called «breadth method» whose basic principle is to draw the line versus (Williamson-Hall plot). We noticed the effect of the temperature rise by increasing the crystallite size. XRD detected distortion microstructure involving variation of the lattice parameter and cell parameter, the elevation of temperature leads to an expansion of the unit cell.

REFERENCES

1. Leoni M., Scardi P. (2000, 09/01/2017) PM2k. Retrieved from http://www.xrd.ing.unitn.it/pm2k/
2. Scherrer P. (1918) Estimation of the size and internal structure of colloidal particles by means of roentgen. *Nachrichten von der Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen,* 26(3), pp. 98-100.
3. Khorsand Z.A., Majid W.H., Abrishami M. E., Yousefi R. (2011) X-ray analysis of ZnO nanoparticles by Williamson–Hall and size–strain plot methods. *Solid State Sciences,* 13(1), pp. 251-256.
4. Williamson G.K., Hall W.H. (1953) X-ray line broadening from filed aluminium and wolfram. *Acta Metallurgica,* 1, pp. 22-31. doi: http://dx.doi.org/10.1016/0001-6160(53)90006-6
5. Hidnert, P. (1925) Thermal expansion of aluminum and various important aluminum alloys. *Journal of the Franklin Institute,* 199(4), pp. 539-541.
6. Wilson A.J.C. (1941) The thermal expansion of aluminium from 0° to 650° C. *Proceedings of the Physical Society,* 53(3), pp. 235.

GENERATOR OF LOW-TEMPERATURE PLASMA FOR NUCLEOPLASTY

E.A. Korotina, A.S. Abrosimova

Scientific Supervisor: Cand. of Engineering, N.M. Fedotov

Language adviser: associate prof., A.N. Panamaryova

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

E-mail: k.korotina28@gmail.com

РАЗРАБОТКА ГЕНЕРАТОРА ХОЛОДНОЙ ПЛАЗМЫ ДЛЯ НУКЛЕОПЛАСТИКИ

Е. А. Коротина, А. С. Абросимова

Научный руководитель: к.т.н. Н.М. Федотов

Консультант: доцент, А.Н. Панамарева

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: k.korotina28@gmail.com

Аннотация. *В настоящей работе мы исследовали низкотемпературную плазму и ее параметры для разработки генератора холодной плазмы для нуклеопластики. На первом этапе нашей исследовательской работы мы изучили более 20-ти патентов на приборы, основной функцией которых являлось образование холодной плазмы в электролитах. Мы выявили наиболее приемлемые параметры разрабатываемого нами генератора, а также следующие особенности:*

1.Плазма формируется в электролите.

2.Для нуклеопластики используется малый размер электрода.

3.Необходимость возбуждения и удержания режима плазмы.

4.Для режима плазмы требуется меньше мощность, чем для нагрева проводящей ткани от прохождения переменного тока высокой частоты.

Первым экспериментальным шагом стало получение холодной плазмы на постоянном токе. При заданных параметрах источника тока, мы получаем холодную плазму в растворе NaCl. Однако сам генератор холодной плазмы мы не можем создавать на постоянном токе, в силу больших напряжений и возможности утечки токов на пациента.

На втором этапе мы, обобщив первые полученные экспериментальные результаты и сведения из патентов, взяли за основу нашего прибора обыкновенный генератор переменного тока и на выходе установили нейтральный провод и непосредственно электрод (мы использовали иглу от медицинского шприца). Экспериментальным путем мы установили, что наша струя плазмы способна разрушить и деформировать поверхность яблока, а также мясо и костные ткани.

Сейчас, на третьем этапе, мы уже занимаемся разработкой макета нашего генератора, а именно подбором идеального электрода, идеальных заданных параметров генератора, а также самого макета

прибора. Решается также вопрос облегчения создания плазмы в условиях работы с костными тканями, т.е. создания такого прибора, электрод которого с наибольшей легкостью сможет наносить повреждения тканей (деформирования), при этом не увеличивая напряжение генератора. Один из вариантов – создание системы подачи электролита непосредственно на электрод и оснащение электрода системой охлаждения, чтобы в процессе операции, при высоких температурах и динамичных движениях деформируемые ткани, а именно белок, не налипали на электрод и не предотвращали тем самым образование плазмы.

Introduction. Plasma is an ionized quasi-neutral gas. Ionized gas contains free electrons, both positive and negative ions. In a broader sense, plasma can consist of any charged particles. Since gas particles are mobile, plasma has ability to conduct an electric current. In the stationary case, plasma screens a constant electric field external towards it due to the spatial separation of the charges. However, due to the presence of a nonzero temperature of charged particles, there is a minimum scale at distances less than those which quasi-neutrality is violated.

Plasma is divided into low-temperature (temperature less than one million K) and high-temperature (temperature of one million K and above) ones. This division is due to the importance of high-temperature plasma in controlled thermonuclear fusion. Various substances pass into the state of plasma at different temperatures, what is explained by the structure of the outer electronic shells of atoms of matter: the easier an atom gives up electrons, the lower the temperature of the transition to plasma state is.

A low-temperature plasma is a plasma whose average electron energy is less than the characteristic ionization potential of an atom (<10 eV); its temperature does not usually exceed 105 K. A low-temperature plasma is used for nucleoplasty and other surgical operations. [2]

The method using cold plasma allows much lower removal (burning out) or dissection of human tissues at temperatures up to 70 ° C than when using conventional electrosurgical devices. The tissue is exposed to a narrowly focused (50-100 μm) cloud of sodium plasma formed on the working surface of the electrode in *NaCl* medium (isotonic saline). The energy of *Na* + ions of plasma cloud is 8 eV and is sufficient for cleavage of the cartilaginous and connective tissue to low-molecular compounds. At the same time, temperature does not increase outside the core. [1]

The method is used in traumatology to perform a wide range of arthroscopic operations. The method makes it possible to carry out manipulations on the cartilaginous tissue and periarticular tissue, to carry out incisions and process the surfaces of the cartilage and ligaments without thermal damage to the treated tissues. There is completely no "sticking effect" of the tissue to the working surface of the electrode.

Analysis of US patents made it possible to reveal the following information: the power supplied to the common electrode and the electrode array would be at high or radio signals, typically from about 20 kHz to 20 MHz, usually between 30 kHz and 1 MHz, and preferably between 50 kHz to 400 kHz. The RMS (RMS) voltage is generally in the range of about 5 volts to 1000 volts, preferably in the range of about 50 volts to 800 volts, and more preferably in the range of about 10 volts to 500 volts.

Research methods. At the first stage of our research, we studied more than 20 patents for instruments, the main function of which was the formation of cold plasma in electrolytes based on the material analyzed. We identified the most acceptable parameters of our generator, as well as the following features:

1.Plasma is formed in the electrolyte.

2. A small electrode size is used for nucleoplasty.

3. The need for excitation and confinement of plasma regime.

4. For plasma regime, less power is required than for heating the conductive tissue from passing an alternating current of high frequency.

Results. The first experimental step was to obtain cold plasma at a constant current. As you can see (*Fig.1)*, the experiment was successful. With the given parameters of the current source, we got cold plasma in *NaCl* solution.

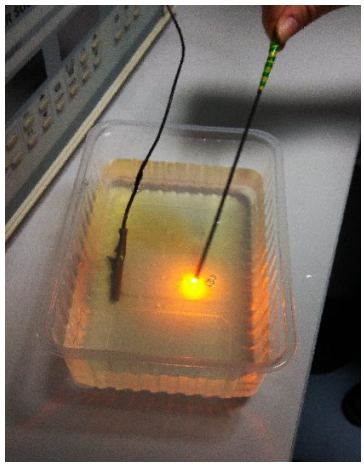


Fig.1. Results on first step

However, we cannot create the cold plasma generator on a direct current due to high voltage and the possibility of leakage of currents to the patient.

At the second stage, we generalized the first experimental results obtained and the information from patents, based on our instrument, an ordinary alternator and installed a neutral wire and, directly, an electrode (we used a needle from a medical syringe). As you can see, we again received plasma in the electrolyte. However, at that time, the voltage was lower and the generator contained a two-stage system to protect against burnout and leakage of current to the patient. Experimentally, we established that our plasma jet can destroy and deform the surface of the apple, as well as meat and bone tissue.

Now, at the third stage we are already working on the development of the model of our generator, namely: the selection of the ideal electrode (material + size), ideal set parameters of the generator, as well as the device itself. The problem of facilitating plasma creation under the conditions of working with bone tissues has also been solved. The creation of such a device, whose electrode with the greatest ease can cause tissue damage (deformation) while not greatly increasing the voltage of the generator. One of the options is to create an electrolyte supply system directly to the electrode and to equip the electrode with a cooling system so that during the operation during high temperatures and dynamic movements, the deformable tissues, namely the protein, do not stick to the electrode, thereby preventing plasma formation.

Conclusion. At the present stage of the work, we have obtained a low-temperature plasma with direct current and alternating current, have tested its effect on real tissues and have obtained the necessary parameters of a low-temperature plasma generator

REFERENCES

1. Biberman, L. M., Vorob'ev, V. S. and Yakubov, I. (1982) Kinetics of a nonequilibrium low-temperature plasma, M.,;
2. Smirnov, B. M. (1982.) Introduction to Plasma Physics, 2nd ed., Moscow

ВЛИЯНИЕ ЛЕГИРОВАНИЯ ВАНАДИЕМ НА СТРУКТУРУ, ФАЗОВЫЙ СОСТАВ И МИКРОТВЕРДОСТЬ ВЫСОКОАЗОТИСТОЙ АУСТЕНИТНОЙ СТАЛИ, ПОДВЕРГНУТОЙ КРУЧЕНИЮ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ

Г.Г. Майер[1], Е.В. Мельников[1], В.А. Москвина[2]

Научный руководитель: доцент, д.ф.-м.н. Е.Г. Астафурова[1]

[1] ФГБУН Институт физики прочности и материаловедения СО РАН,

Россия, г. Томск, пр. Академический, 2/4, 634055

[2]Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: galinazg@yandex.ru

INFLUENCE OF THE VANADIUM ALLOYING ON STRUCTURE, PHASE COMPOSITION AND MICROHARDNESS OF AUSTENITIC HIGH-NITROGEN STEEL PROCESSED BY HIGH PRESSURE TORSION

G.G. Maier[1], E.V. Melnikov[1], V.A. Moskvina[2]

Scientific Supervisor: assistant professor, Dr. E.G. Astafurova[1]

[1]Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS,

Russia, Tomsk, pr. Akademichesky, 2/4, 634055

[2]Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: galinazg@yandex.ru

Abstract. *The influence of V-alloying on microstructure, phase composition and microhardness of high-nitrogen austenitic steels processed by high-pressure torsion (HPT) was investigated. HPT leads to fragmentation of steel structure and increases steel microhardness by ~1.5 times after one revolution of HPT. The different evolution of microhardness of steels investigated with increasing strain was observed. The V-alloying of steel promotes change of the mechanism of deformation under high-pressure torsion: from slip and twinning in V-free steel to slip and formation of localized deformation microbands and precipitation hardening in V-containing steel.*

Аустенитные стали, упрочненные атомами внедрения азотом и углеродом, дисперсными частицами вторичных фаз (карбидами и нитридами) представляют собой важный класс современных конструкционных материалов. Для получения высокой прочности в этих сталях используют не только твердорастворное упрочнение и дисперсионное твердение, но и интенсивную пластическую деформацию (ИПД). Работ по деформированию методами ИПД аустенитных сталей с высокой концентрацией атомов внедрения очень мало, так как аустенитные стали испытывают сильный наклеп при деформации и вызывают разрушение оснастки. Введение в аустенитную матрицу ванадия приводит еще к большим эффектам деформационного упрочнения за счет дисперсионного твердения и эволюции дисперсных частиц в условиях интенсивного деформирования. Поэтому изучение структурно-фазового состояния, установление механизмов деформации при интенсивной пластической деформации высокоазотистых сталей, легированных ванадием, является важным направлением современного материаловедения.

Проведено исследование влияния ИПД кручением под высоким давлением на структуру, фазовый состав и микротвердость аустенитных высокоазотистых сталей Fe-23Cr-20Mn-0,2C-0,5N-0,06V, мас.% (Х23АГ20) и Fe-20Cr-20Mn-0,3C-0,9N-1,34V (Х20АГ20Ф). Стали в исходном состоянии (диски диаметром 10 мм и толщиной 0,7 мм) закаливали в воду после часовой выдержки при 1200 °С. Деформацию образцов проводили методом кручения под высоким давлением (КВД, Р=6 ГПа) на наковальнях Бриджмена при комнатной температуре на N=0, ¼, ½ , 1 оборот.

Микроструктуру сталей исследовали методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ, Technai G2 FEI, 200 кВ). Микротвердость до и после КВД измеряли на микротвердомере Duramin 5 с нагрузкой Р=200 г. Среднее значение микротвердости вычисляли по измерениям, проведенным на середине радиуса дисков. Рентгеновские исследования выполняли на дифрактометре Shimadzu XRD-6000 с использованием Cu Kα излучения.

В исходном состоянии исследуемые стали имеют структуру аустенита со средним размером зерна 100 мкм. Плотность дислокаций, рассчитанная на основе анализа уширения рентгеновских линий, составляла $\rho \sim 10^9$ см$^{-2}$. Параметр решетки (а) аустенита составлял 0,3646 нм для стали Х23АГ20 и 0,3637 нм для стали Х20ФГ20Ф, что свидетельствует о высокой концентрации атомов азота и углерода в твердом растворе после закалки. На рентгенограмме, соответствующей исходному состоянию стали Х23АГ20, наблюдали рефлексы от аустенита и α-железа (5 %), в стали Х20ФГ20Ф помимо аустенита и α-железа обнаружены рефлексы с межплоскостными расстояниями близкими к V(C, N) (a=0,41 нм) (рис.1). Сильные линии для α-Fe и нитрида VN расположены на близких углах и разделить их сложно, присутствие α-Fe в структуре стали до и после КВД дополнительно подтверждено методом магнитофазового анализа.

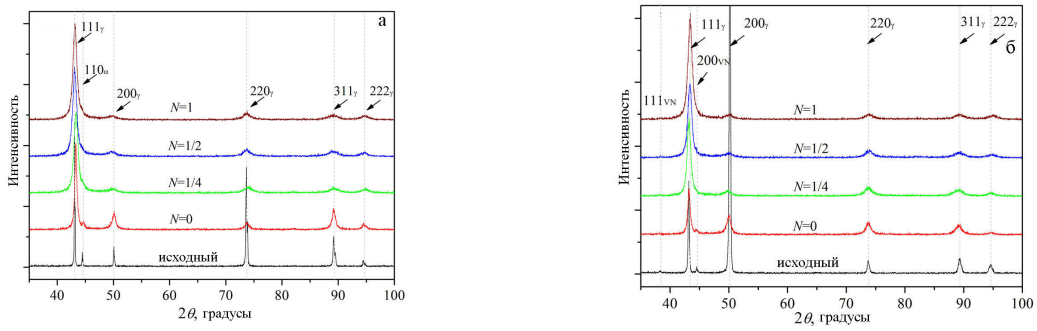


Рис. 1. Рентгенограммы для сталей Х23АГ20 (а) и Х20АГ20Ф (б) в исходных состояниях и после КВД

После деформации происходит фрагментация структуры, наблюдали уменьшение интенсивности и уширение рентгеновских линий. Значения микродеформации кристаллической решетки (Δd/d) возрастают на порядок от ~10^{-4} в исходных состояниях до 4,8×10^{-3} (Х23АГ20) и 4,0×10^{-3} (Х20АГ20Ф), а размеры областей когерентного рассеяния уменьшаются от ~ 80 нм в исходных состояниях до 15 нм после КВД на один полный оборот. Параметр решетки стали после КВД изменяется слабо, это свидетельствует о постоянстве концентрации атомов внедрения в твердом растворе при деформации.

Электронно-микроскопические изображения структуры исследуемых сталей в исходном состоянии и после КВД представлены на рисунке 2. Характерной дислокационной структурой сталей Х23АГ20 и Х20АГ20Ф в исходных состояниях являются плоские скопления, дефекты упаковки и микродвойники. На

дифракционных картинах стали Х20АГ20Ф дополнительно к рефлексам аустенита и двойников наблюдали отражения от карбонитридов V(C, N). КВД на один полный оборот стали Х23АГ20 приводит к образованию сетки двойников. Скалярная плотность дислокаций возрастает до $4{,}4\times10^{11}$ см$^{-2}$. Микродифракционные картины представлены точечными рефлексами от матрицы, двойников и ε-мартенсита (рис. 2 б). Кручение на один полный оборот стали Х20АГ20Ф сопровождается фрагментацией структуры, образованием полос локализованной деформации и двойников, но двойникование развито не так сильно как в стали без V. Рефлексы на дифракционных картинах сильно размыты и располагаются по окружности, это указывает на формирование разориентированной поликристаллической структуры ($\rho=4{,}0\times10^{11}$ см$^{-2}$). Дополнительно к аустениту на микродифракционных картинах наблюдали точечные рефлексы от крупных частиц и сплошные кольца V (C, N) (рис. 2д), размытые в радиальном направлении и свидетельствующие о наличии мелкоразмерных частиц. Появление дисперсной фазы обусловлено частичным растворением крупных частиц и последующим выделением их из твердого раствора при деформации. Легирование стали ванадием приводит к обеднению аустенита по азоту за счет образования карбонитридов, это сопровождается повышением энергии дефекта упаковки и, как следствие, подавляет развитие двойникования и приводит к активации локализации пластического течения в стали Х20АГ20Ф.

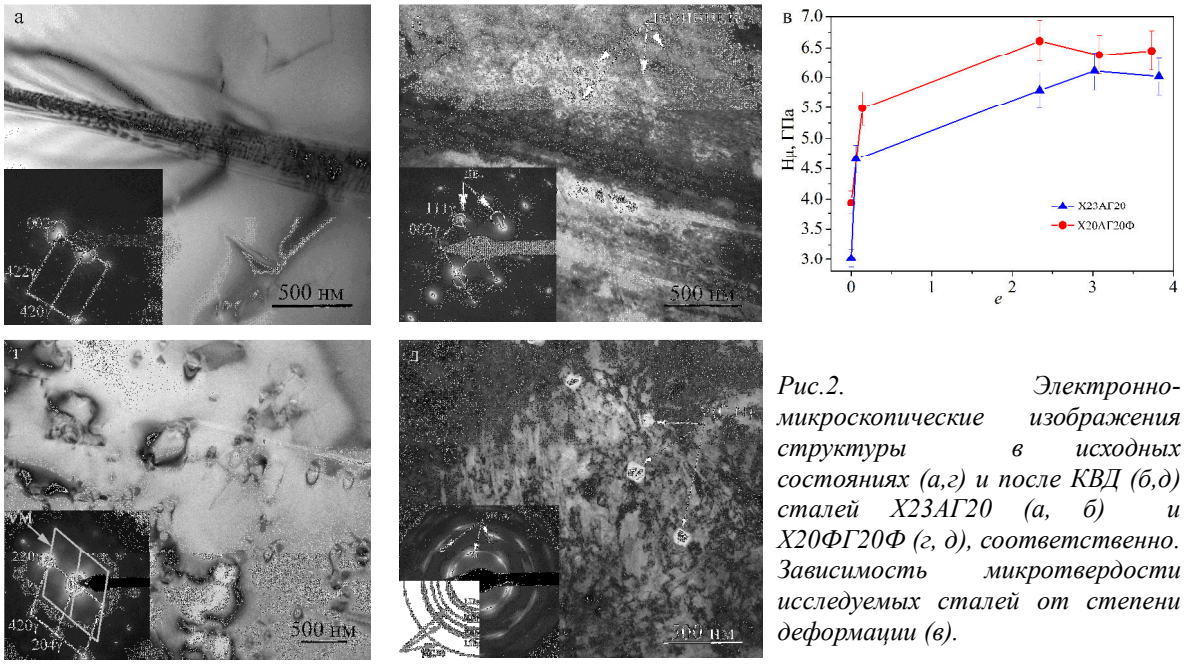


Рис.2. Электронно-микроскопические изображения структуры в исходных состояниях (а,г) и после КВД (б,д) сталей Х23АГ20 (а, б) и Х20ФГ20Ф (г, д), соответственно. Зависимость микротвердости исследуемых сталей от степени деформации (в).

Данные микроструктурных исследований находятся в полном согласии с исследованиями эволюции микротвердости ($H\mu$) сталей. Наблюдали рост значений $H\mu$ после осадки на 1,5 ГПа в сравнении с исходными значениями (3 ГПа и 4 ГПа соответственно для сталей Х23АГ20 и Х20АГ20Ф). Микротвердость стали Х23АГ20 за счет активного развития двойникования, которое способствует деформационному упрочнении, достигает максимума после N=1/2. В стали Х20АГ20Ф максимальное значение $H\mu$ достигнуто после N=1/4, что сопровождается деградацией двойниковых границ и образованием разориентированной зеренно-субзеренной структуры.

Работа выполнена при финансовой стипендии Президента РФ (СП-4682.2013.1).

INVESTIGATION OF THE APPLIED VOLTAGE INFLUENCE ON THE IONIZING RADIATION PARTICLES DETECTING BY DIAMOND DETECTORS

V.V. Okhotnikov, S.A. Linnik, A.V. Gaydaychuk

Scientific Supervisor: Dr. S.A. Linnik

Language advisor: A.K. Ustyuzhanina

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

E-mail: vvohotnikov@yandex.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПРИКЛАДЫВАЕМОГО НАПРЯЖЕНИЯ НА ДЕТЕКТИРОВАНИЕ ЧАСТИЦ ИОНИЗИРУЮЩЕГО ИЗЛУЧЕНИЯ АЛМАЗНЫМИ ДЕТЕКТОРАМИ

В.В. Охотников, С.А. Линник, А.В. Гайдайчук

Научный руководитель: к.т.н. С.А. Линник

Лингвистический руководитель: А.К. Устюжанина

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: vvohotnikov@yandex.ru

Аннотация. *Мы сообщаем об исследовании влияния приложенного напряжения на способность алмазных детекторов улавливать и передавать пригодный для считывания сигнал ионизирующего излучения. Измерения проводились на образцах детекторов поликристаллического алмаза детекторного качества (5 мм × 5 мм × 500 мкм) в диапазоне напряжений от -1000 В до 1000 В путем облучения β-частицами Sr.*

Introduction. The one of the problems of modern technologies for the calculation and determination of a wide range of particles that are studied in the field of space, fundamental physics and nuclear technologies is a process of fast high-energy ionizing particles detection with large volumes and for a long time. Particle detectors, which are used to detect, track, or identify high energy particles typically consist of a detection volume and an amplifier. The ionizing particle is crossing the detection volume and creating charge carriers that are read and amplified to the level of the measurable signal. In this case, silicon and similar detectors suffer from the high degree of degradation with prolonged exposure of ionizing radiation. Therefore, it is urgent to research and develop a new technologies for the application of a wide range of materials that could expand the technological capabilities of using detectors in different environments and for various purposes.

The diamond combines several outstanding properties, such as the highest hardness, thermal conductivity, chemical inertness and exceptional strength. Consequently, the diamond is attractive not only for jewelry, but also it is interesting for scientific and technological purposes throughout the world. As a wide-gap semiconductor, diamond has a low density of charge carriers, it has the highest radiation resistance and high detection rate due to the high mobility of charge carriers of both electronic and hole conductivity [1]. At the same time, the higher the applied voltage to the detector mean the greater the detection rate, which makes it possible to read a high volume of incoming data. It is to determine the optimal parameters of the applied voltage.

Materials and research methods. The diamond detectors usually consist of parallel plate with two metallized surfaces as electrodes. The new developments of diamond detectors use 3D geometry, where the electrodes are located inside a bulk material. In the work, industrial samples of diamond detectors of detector quality (5mm X 5mm X 500mkm) were used, contacts were made by W / Ti layers with a summary thickness around 150μm. The principle of operation: a high voltage is applied to the electrodes for electric field creation inside the diamond volume. The ionizing particle (β-particle Sr), passing through the diamond bulk and creates an electron-hole pairs by ionization. The average ionization energy of a diamond is about 13.2 eV [2], which leads to the creation of 36 electron-hole pairs per 1 μm diamond thickness for a minimal ionizing particle (MIP) [3]. The electric field forces the charge carriers to drift to the electrodes. This drift of the charge carriers causes directly the current in the reading circuit after the Ramos law [4]. The measurements were carried out on a Keithley 6485 picaampermeter for 8000 seconds in a range from -1000V to 1000V in 200V increments.

Результаты. The results of measurements are shown in Fig. 1. In ideal conditions, the graphs should be identical for different applied voltages and differ only in the output current and be a straight line with uniform periodic oscillations with an amplitude of the order of 100 pA.

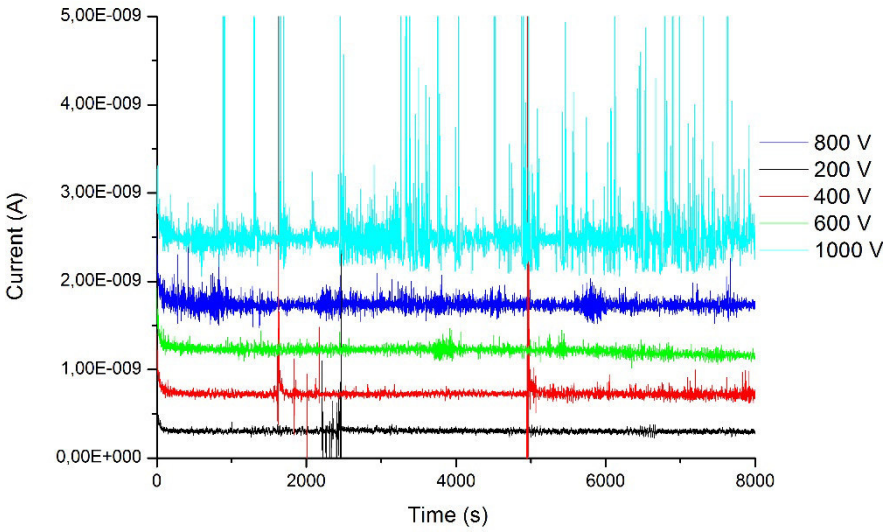


Fig. 1. The measurements of the produced current when the detectors are irradiated by β-particles of Sr with a positive voltage applying.

With the voltage decreasing, the stability of the measurements increases. At the same time, in the range of more than 600 and below -600 volts there are large fluctuations in the signal, this is do not allow the signal to be read sufficiently cleanly and correctly.

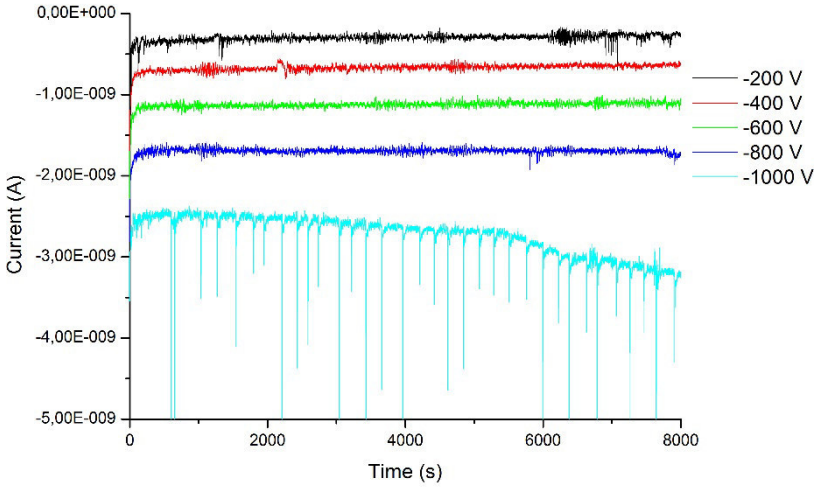


Fig. 2. The measurements of the produced current when the detectors are irradiated by β-particles of Sr with a negative voltage applying.

A stable and readable signal is observed in the range from -600 to 600 volts, which is nevertheless contains a rather significant amount of noise, which should be filtered out during the measurements. It is also worth noting that with an irradiation time more than 5500 s the signal degradation is observed, this is happened by the internal degradation of the material and is unstable due to the heterogeneity of the material and the structure of the defects in the detectors lattice.

Conclusion. The most successful voltage application is order of -600 V, which corresponds to an approximately 1 V/μm of detecting material. Such a voltage makes it possible to increase the rate of recombination in the semiconductor detector volume and to increase the rate of ionizing particles reading which cause the creation of electron-hole pairs. At the same time, it is possible to filter noise from the measured parameters and introduce an allowable error in the overall measurements.

REFERENCES

1. Spear K. (1994) Synthetic diamond: Emerging CVD Science and Technology. Wiley Interscience Publication.
2. Canali C. (1997) Electrical properties and performances of natural diamond nuclear radiation detectors // Nuclear Instruments and Methods, no. 160. – pp. 73–77.
3. Pomorskiy M. (2009) Electronic Properties of Single Crystal CVD Diamond and its Suitability for Particle Detection in Hadron Physics Experiments: Ph. D. thesis – Johann Wolfgang Goethe University in Frankfurt am Main.
4. Ramo S. (2003) Currents Induced by Electron Motion // Proceedings of the I.R, no. 27, pp. 584–585.

APPROACHES FOR SUBSTRATE FUNCTIONALISATION WITH SILVER NANOPARTICLES

A. A. Sharonova, M. A. Surmeneva

Scientific Supervisor: R.A. Surmenev, Associate Prof.

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

E-mail: rsurmenev@mail.ru

СПОСОБЫ ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИИ ТИТАНОВЫХ ИМПЛАНТАТОВ НАНОЧАСТИЦАМИ СЕРЕБРА

А. А. Шаронова, М. А. Сурменева

Научный руководитель: Сурменев Р.А., к.ф.-м.н., доцент кафедры ЭФ ФТИ ТПУ

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: rsurmenev@mail.ru

Аннотация. *Работа посвящена поиску оптимального метода функционализации металлических титановых подложек наночастицами серебра для формирования антибактериального интерфейса на поверхности экспериментальных образцов.*

Introduction. Pure titanium is commonly used as implants in both dental and orthopedic clinics because of its biocompatibility and mechanical properties [1]. It is commonly known that an implant may be rejected by the human body. Moreover, a wide range of local tissue reactions, in particular inflammation, giant cell formation and fibrosis can be induced. A promising solution to this problem is fabrication of an antibacterial bioactive coating on the implant surface, which allows one to avoid rejection and speed up the treatment and recovery process [2]. A good way to overcome this challenge is functionalization of implant surface with silver nanoparticles (AgNPs) as antibacterial agent. The remarkable mechanism of the antimicrobial activity of AgNPs is connected with the formation of free radicals and consequent free-radical-induced oxidative damage of the cell membranes of bacteria [3, 4]. The purpose of these bioactive surfaces is to disrupt the metabolic machinery of the microbes or to prevent bacterial adhesion to the implant and, consequently, the development of biofilm [5]. Among the existing methods, the chemical methods have been mostly used for production of AgNPs. Chemical methods provide an easy way to synthesize AgNPs in solution [6, 7]. The most recently available methods for the fabrication of antibacterial films include electron beam lithography and nanoimprint lithography, both can completely control the micromorphology of the nanostructures for the design with unique localized surface plasmon resonance spectrum [8]. However, these methods require sophisticated fabrication equipment and are limited by either expensive cost or small sample size in practical applications. Instead, some simpler bottom-up approaches based on self-assembly, e.g., Langmuir-Blodgett, dip coating, and electrochemical deposition, have shown great convenience in large-scale fabrication [9]. Such techniques allow producing noble metal nanoparticle thin films with large areas.

Experimental part. The paper considers a series of rapid and simple methods of silver coatings fabrication, such as dip coating, sessile droplet and room temperature electrophoretic deposition (EPD).

According to [10] the AgNPs were synthesized in aqueous solutions: PVP-stabilized NPs with a diameter of the metallic core of 70 ± 20 nm, and negative charge of -15 mV.

The deposition of PVP stabilized AgNPs on titanium substrates was carried out using three approaches:

- *Drop drying or sessile droplet* - the process which is based on the formation of a droplet 120 µL of the working solution with concentration 60 µg mL^{-1} in water and following drying at 55.5°C.
- *Dip-coating* - the sample was dipped into 5 mL of the working solution with the same concentration and kept for 24 hours with the subsequent drying at 55.5°C.
- *Electrophoretic deposition* - the deposition was achieved by the motion of charged PVP-coated AgNPs particles dispersed in working solution towards an electrode under the applied electric field.

Prior to electrophoretic deposition, two types of working solutions were prepared. The first solution was prepared with distilled water and the second one was based on absolute ethanol with the concentration of 60 µg mL^{-1}. Electrophoretic motion of the charged particles during EPD results in the accumulation of particles and the formation of a homogeneous and rigid deposit at the relevant (deposition) electrode-titanium sample. Figure 1 shows the results of titanium substrate functionalized with AgNPs.

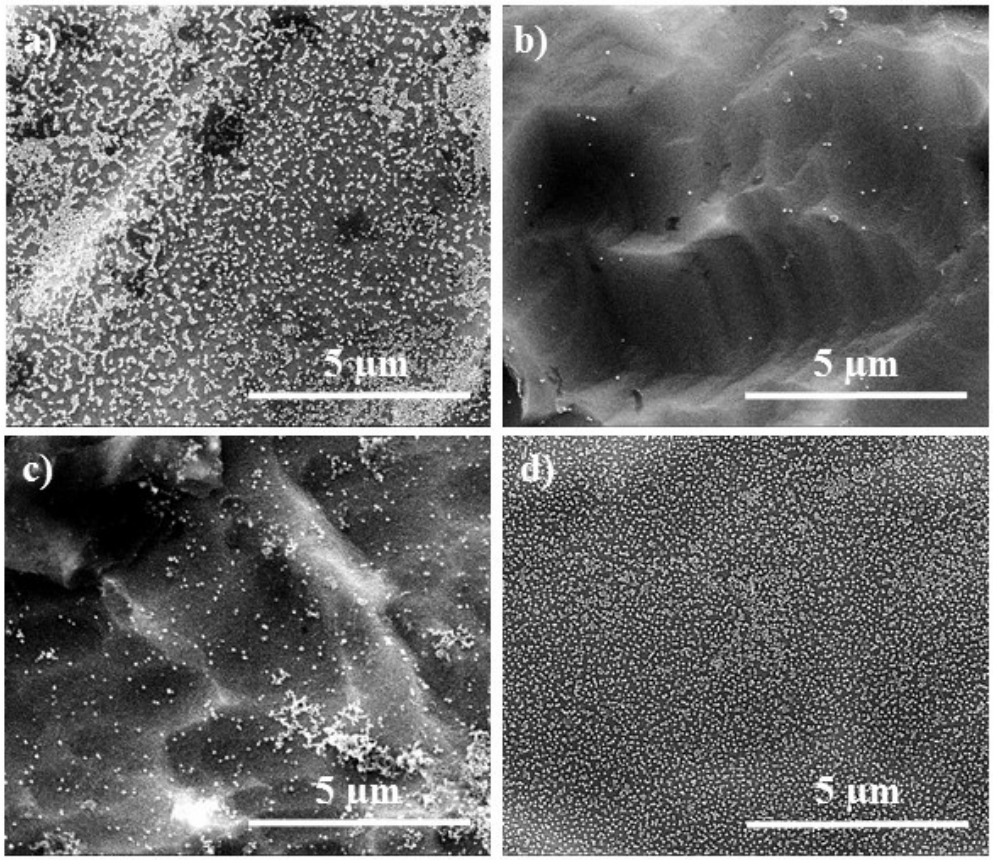


Fig. 1. Titanium substrates functionalized with PVP-stabilized AgNPs a) sessile droplet 120 µL, b) dip-coating, c) EPD in water (3 V, 60 min), d) EPD in ethanol (50 V, 30 min). The concentration of the working solution was 60 µg mL^{-1} in each experiment.

Results. Figure 1 shows that the most effective approaches for surface functionalization are sessile droplet and EPD. The SEM analysis confirmed the ability to attain a uniform distribution of AgNPs in case of

EPD approach. Sessile droplet method has the disadvantage associated with the surface tension and consequently the samples are not fully coated with AgNPs. The sessile droplet method has the disadvantage associated with the deposition process on special design implants.

Conclusion. Functionalization of titanium substrates with AgNPs was carried out using sessile droplet, dip-coating and EPD approaches. According to the SEM results the most effective methods for surface functionalization was EPD. The PVP-stabilized AgNPs with a diameter of the metallic core of 70 ± 20 nm, negative charge of -15 mV were synthesized in aqueous solution indicating monodisperse system and absence of large agglomerates.

The authors are thankful to Prof. M. Epple, Dr. Kateryna Loza and Dr. Oleg Prymak, University of Duisburg-Essen, Germany, for the assistance with SEM and XRD measurements. This research was supported by the Russian Science Foundation (15-13-00043) and Russian President scholarship (SP-444.2016.4).

REFERENCES

1. Hanawa T. (2010) Biofunctionalization of titanium for dental implant. Japanese Dental Science Review, vol. 46, no. 2, pp. 93–101.
2. 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.
3. Gupta K., Singh R. P., & Pandey A. (2013) Photocatalytic antibacterial performance of TiO_2 and Ag-doped TiO_2 against S. aureus. P. aeruginosa and E. coli. Beilstein Journal of Nanotechnology, no 4, pp. 345–351.
4. Hwang E. T., Lee J. H., Chae Y. J., Kim Y. S., Kim B. C., Sang B. I., & Gu M. B. (2008) Analysis of the toxic mode of action of silver nanoparticles using stress-specific bioluminescent bacteria. Small, no. 4, pp. 746–750.
5. Ketonis C., Parvizi J., & Jones L. C. (2012) Evolving Strategies To Prevent Implant-associated Infections. JAAOS, no. 20, pp. 478–80.
6. Chen S., & Zhang H., (2012) Aggregation kinetics of nanosilver in different water conditions. Adv. Nat. Sci.: Nanosci. Nanotechnol, no. 3, p. 035006.
7. Dang T. M. D., Le T. T. T., Fribourg-Blanc E., & Dang M. C. (2012) Influence of surfactant on the preparation of silver nanoparticles by polyol method. Adv. Nat. Sci.: Nanosci. Nanotechnol, no. 3 p. 035004.
8. Berkovitch N., Ginzburg P., & Orenstein M. (2010) Concave plasmonic particles: broad-band geometrical tunability in the near-infrared. Nano Lett, no. 10, pp. 1405–1408.
9. Zhang X. Y., Hu A., Zhang T., Lei W., Xue X. J., Zhou Y., & Duley W. W. (2011) Self-assembly of large-scale and ultrathin silver nanoplate films with tunable plasmon resonance properties. ACS Nano, no. 5, pp. 9082–9092.
10. 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.

МИКРОСТРУКТУРА И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СТАБИЛЬНОЙ АУСТЕНИТНОЙ СТАЛИ ПОСЛЕ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ

С.А. Аккузин

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

Национальный исследовательский Томский государственный университет,

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

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

MICROSTRUCTURE AND MECHANICAL PROPERTIES OF STABLE AUSTENITIC STEEL AFTER THERMOMECHANICAL TREATMENT

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 features of microstructure and mechanical properties of stable austenitic steel after thermomechanical treatment consist of low-temperature deformation, warm deformation and subsequent annealing have been investigated. It is shown that under these conditions in the steel direct (γ → α')- and inverse (α' → γ)-martensitic transformations are realized. As a result of the thermomechanical treatment submicrocrystalline structural states with a high density of micro- and nanotwins and localized deformation bands are formed. The yield strength of these structural states more than 3 times increases by the original value.*

Введение. В настоящее время в метастабильных аустенитных сталях показана возможность формирования субмикро- и нанокристаллических структурных состояний в процессе прямых (γ → α')- и последующих обратных (α' → γ)-мартенситных превращений после различных термомеханических обработок (ТМО) [1–2]. Указанные ТМО обеспечивают повышение (в несколько раз) прочностных свойств метастабильных аустенитных сталей [3]. Характерной особенностью полученного структурного состояния после ТМО является ламельный субмикрокристаллический аустенит с микро- и нанодвойниками деформации [1–2].

Возможность формирования субмикро- и нанокристаллических структурных состояний в стабильных аустенитных сталях в условиях ТМО сочетающих низкотемпературную и теплую деформацию изучены относительно мало. В связи с этим, целью настоящего исследования является изучение влияния термомеханической обработки на микроструктуру и механические свойства стабильной аустенитной стали.

Материалы и методы исследования. В настоящей работе исследована хромоникелевая стабильная аустенитная сталь 02Х17Н14М3 после ТМО. Исходное состояние (~ 100 % аустенита) получено закалкой Т = 1100 °С, 1 час. В этом состоянии в стали наблюдается ячеистая дислокационная субструктура; средний размер зерна аустенита ~ 40 мкм. Исходный размер образцов ~ 30×20×11 мм.

ТМО проводили в три этапа: низкотемпературная деформация, последующий теплая деформация и завершающий отжиг. Низкотемпературную деформацию осуществляли прокаткой вблизи температуры

жидкого азота (T = - 196 °C) в несколько проходов с общей степенью деформации ε ≈ 20 %. Последующая теплая деформация проводилась при температуре T = 600 °C за два прохода с общей степенью деформации ε ≈ 40 %. Завершающий отжиг осуществляли при T = 800 °C, 200 с.

Дефектную структуру изучали методами просвечивающей электронной микроскопии и рентгеноструктурного анализа (РСА). Механические испытания осуществляли методом активного растяжения с использованием образцов в форме двойных лопаток с размерами рабочей части 13×2×1 мм.

Результаты. РСА показал, что низкотемпературная деформация ε ≈ 20 % аустенитной стали 02Х17Н14М3 приводит к формированию до ≈ 7 % объемной доли α'-мартенсита, что в 7 – 8 раз меньше по сравнению с объемной долей мартенсита после низкотемпературной прокатки метастабильной аустенитной стали 08Х18Н10Т [1–3].

После низкотемпературной прокатки наблюдается преимущественно субмикрокристаллическая аустенитная структура с высокой плотностью микро- и нанодвойников деформации и небольшим количеством пластин α'-мартенсита. Микро- и нанодвойники залегают в нескольких плоскостях двойникования. Встречаются области с множеством нанодвойников с размером пластинок ≈ 50 нм (рис. 1) в ширину, а также области с высокой плотностью дислокаций и дефектов упаковки.

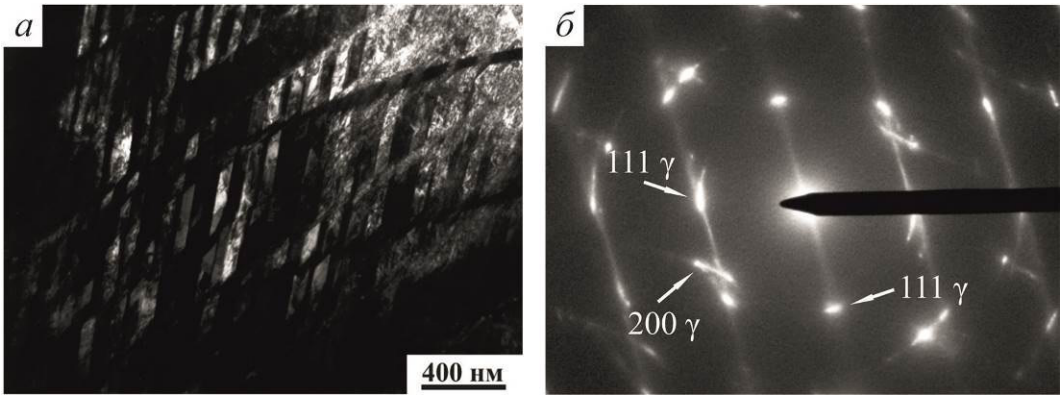


Рис. 1. Микроструктура стали 02Х17Н14М3 после низкотемпературной деформации: а) темнопольное изображение, снятое в рефлексе g = [200] γ; б) соответствующая дифракционная картина к а)

Указанное структурное состояние обеспечивает высокие прочностные свойства стали: предел текучести $\sigma_{0,1} \approx 933 – 1047$ МПа, предел прочности $\sigma_B \approx 1065 – 1214$ МПа и пластичность $\delta \approx 7 – 9,3$ %. Полученные предел текучести и пластичность сравнимы с прочностными свойствами стали 08Х18Н10Т после низкотемпературной прокатки, в которой содержание α'-мартенсита ≈ 54 %.

Последующая деформация при температуре T = 600 °C приводит к повышению предела текучести до ≈ 1044 – 1150 МПа. При этом пластичность составляет $\delta \approx 6,3 – 8$ %, а объемное содержание мартенсита уменьшается до ≈ 1,7 %. В этой структуре сохраняются микро- и нанодвойники, наследованные после низкотемпературной деформации (рис. 2).

Особенностью структуры является наличие полос локализации деформации (ПЛД), которые формируются в микродвойниковой структуре аустенита. Внутри ПЛД были обнаружены наноразмерные ламели α'-мартенсита и аустенита [4]. Предполагается, что повышение предела текучести до 1150 МПа связано с особенностью микроструктуры, содержащей высокую плотность двойников и ПЛД.

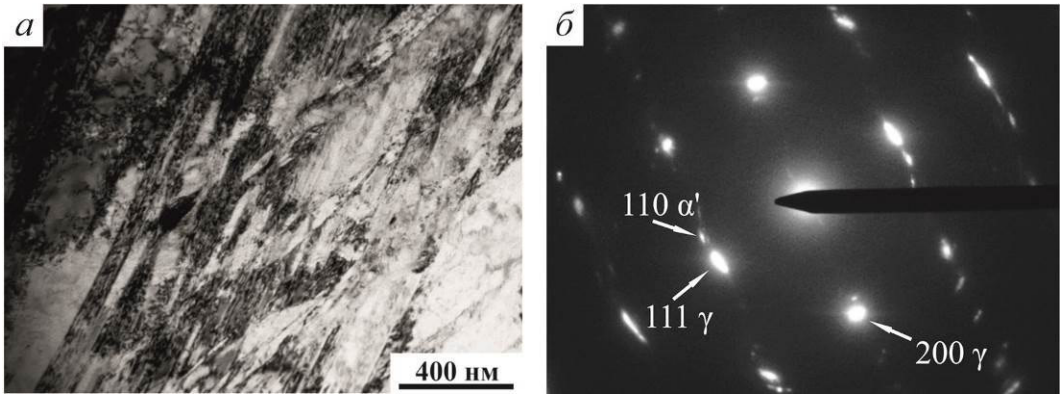


Рис. 2. Микроструктура стали 02Х17Н14М3 после низкотемпературной и последующей теплой деформации при Т = 600 °С: а) светлопольное изображение; б) соответствующая дифракционная картина к а)

После финального отжига при Т = 800 °С сформированные в процессе теплой деформации ПЛД с наноразмерными ламелями α'-мартенсита и аустенита в структуре не обнаруживаются. Предполагается, что в процессе отжига фрагменты ПЛД трансформируются в равноосные зерна аустенита. Кроме того, с помощью отжига при Т = 800 °С удается повысить значение пластичности до 16 %. Однако с повышением пластичности наблюдается снижение предела текучести до $\sigma_{0,1} \approx 867 – 890$ МПа.

Заключение. В результате ТМО с низкотемпературной и последующей теплой деформацией в стабильной аустенитной стали 02Х17Н14М3 были сформированы субмикрокристаллические структурные состояния с высокой плотностью микро- и нанодвойников деформаций, ПЛД и объемным содержанием аустенита до ≈ 99 %. В формировании указанных состояний участвуют прямые (γ → α')- и обратные (α' → γ)-мартенситные превращения. Эти особенности микроструктуры обеспечивают повышение предела текучести стали более чем в 3 раза по сравнению с исходными значениями.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1 Litovchenko I.Yu., Akkuzin S.A., Polekhina N.A., Tyumentsev A.N., Naiden E.P. The features of microstructure and mechanical properties of metastable austenitic steel subjected to low-temperature and subsequent warm deformation // Russian Physics Journal. – 2016. – V. 59. – № 6. – P. 782–787.

2 Akkuzin S.A., Litovchenko I.Yu., Polekhina N.A., Tyumentsev A.N. Effect of thermomechanical treatment modes on structural-phase states and mechanical properties of metastable austenitic steel // AIP Conference Proceedings. – 2016. – V. 1783. – P. 020001-1-020001-4.

3 Пат. 2598744 РФ. МПК C21D8/00, C21D6/04, C21D6/00, C21D7/13. Способ термомеханической обработки метастабильной аустенитной стали / И.Ю. Литовченко, А.Н. Тюменцев, С.А. Аккузин, Н.А. Полехина. Заявлено 24.06.2015; Опубл. 06.09.2016.

4 Litovchenko I.Yu., Akkuzin S.A., Polekhina N.A., Tyumentsev A.N. Features of deformation localization in stable austenitic steel under thermomechanical treatment // AIP Conference Proceedings. – 2016. – V. 1783. – P. 020134-1-020134-4.

ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЙ ГИДРОФИЛЬНЫХ СВОЙСТВ МИКРОРАЗМЕРНОГО ПОРОШКА ZrO_2(Mg)

В.П. Алексеенко

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

ФГБУН Институт физики прочности и материаловедения СО РАН

Россия, г. Томск, пр. Академический, 2/4, 634055

E-mail: v-alekseenko@mail.ru

STUDY OF CHANGE OF HYDROPHILOUS PRORETY OF MICROSIZE ZrO_2(Mg) POWDER

V.P. Alekseenko

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

Institute of Strength Physics and Material Science SB RAS

Russia, Tomsk, Akademicheskii str., 2/4, 634055

E-mail: v-alekseenko@mail.ru

Abstract. *Change of hydrophilous property of microsize zirconia powder is investigated. The study has shown that the hydrophilous properties grow after plasma's treatment. The experimental data demonstrate that there exists direct correlation between the hydrophilous properties growth and the treatment time.*

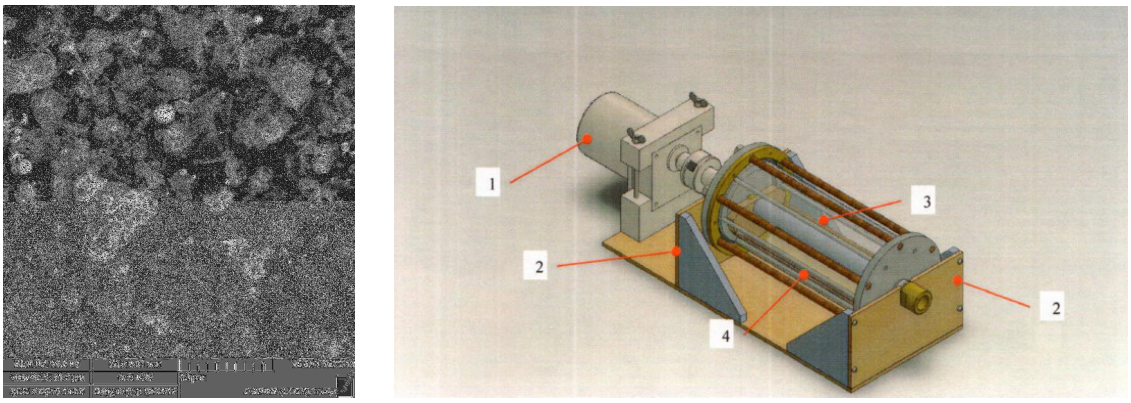
Ведение. В настоящее время керамические материалы широко используются в самых разных отраслях. Так, например, благодаря своим свойствам (высокая твердость, коррозионная и термостойкость и т.д.) керамика на основе диоксида циркония нашла обширное применение в авиакосмической отрасли, а композитные материалы ZrO_2 – MgO представляют большой интерес в медицине, в области производства остеозамещающих имплантатов [1]. За последнее время было опубликовано много работ посвященных теме плазменного нанесения оксидных порошковых покрытий и изучения свойств этих покрытий. При этом тема изменения свойств самих порошков под действием плазмы мало изучена. Одним из свойств, изменение которого можно наблюдать, является химическая активность. Под действием плазменной обработки на поверхности порошков образуются активные центры, которые влияют на влагопоглощающие свойства порошка. Известно [2], что взаимодействие твердого тела с водой носит кислотно-основной характер. Поскольку взаимодействие происходит не на всей поверхности, а лишь на активных центрах, то такое взаимодействие зависит от концентрации и типа центров. При этом в результате увеличения химической активности частиц возможен рост числа агломератов, что приведет к снижению удельной поверхности частиц и снижению количества активационных центров.

В общем случае в водно-порошковой суспензии в ходе взаимодействия активационных центров с молекулами воды в систему выделяются продукты реакции H^+ или OH^-, которые соответственно изменяют уровень кислотности суспензии. В работе [3] было показано, что увеличение уровня кислотности свидетельствует о большей смачиваемости порошков, т.е. увеличении их гидрофильных свойств. На основании работы [4] были сделаны предположения, о том, что плазменная обработка должна повысить гидрофильные свойства обрабатываемого порошка.

Таким образом, целью данной работы было изучение изменений гидрофильных свойств микродисперсного порошка диоскида циркония при обработке низкотемпературной неравновесной плазмой в воздушной среде при атмосферном давлении.

Материал и методика эксперимента. Исследованы порошки ZrO_2 стабилизированного 3 мольными % MgO. Порошок имел пенообразную форму (рисунок 1а) с размером агломератов около 20 мкм. и размером кристаллитов порядка 20-50 нм.

Плазменная обработка порошка производилась на уникальной установке Гермес-М, разработанной ООО «НПО «Лазерные технологии и системы». Установка является генератором низкотемпературной неравновесной газоразрядной плазмы высокого давления (1 атмосфера), рабочий газ – воздух. Для равномерной обработки порошка осуществлялось его перемешивание за счет вращения колбы-картриджа (рисунок 1б, элемент 3). Обработка производилась при неизменных параметрах установки, а именно частота разрядов составляла 885 Гц, энергия одного разряда – 0,21 Дж. В ходе исследований изменялось только время обработки от 1 до 10 минут.



а) *б)*

Рис. 1.а) – СЭМ порошка ZrO2(Mg); б) – Электронный узел Гермес-М., 1 – двигатель системы вращения картриджа, 2 – стойки, 3- колба-картридж с электродом, 4 высоковольтный электрод.

Для исследований изменений гидрофильных свойств было приготовлено несколько образцов суспензии. Суспензия состояла из 1,1 г. порошка с различным временем обработки и 50 мл. дистиллированной воды.

Для снижения количества новообразованных в ходе плазменного облучения агломератов водно-порошковая суспензия подвергалась 2 минутной ультразвуковой обработке.

Результаты и обсуждение. На рисунке 2 представлена зависимость уровня кислотности суспензии от времени обработки порошка. Полученные результаты свидетельствуют о том, что с увеличением времени обработки происходит повышение смачиваемости обрабатываемого порошка. Так суспензия, приготовленная из порошка подвергнутого десятиминутной обработки, показала самую большую кислотность равную 5,87 pH, что на 37 % и 32 % больше чем у суспензий приготовленных из необработанного и подвергнутого одноминутной обработке порошков соответственно.

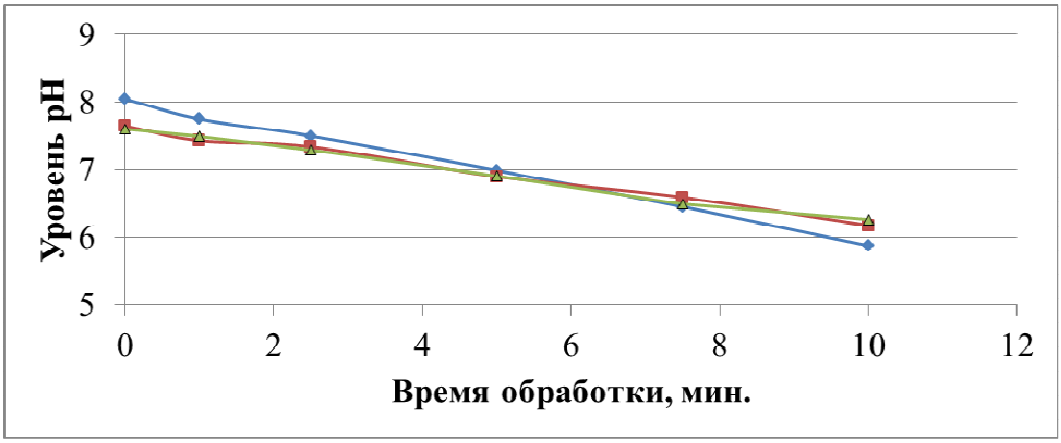


Рис. 2. Зависимость уровня pH суспензии от времени обработки порошка ZrO_2+Mg.
1 – через 1 час после обработки, 2 – через 3.5 часа, 3 – через 24 часа.

Изучено влияние времени выдержки порошка в суспензии. С этой целью проведено измерение уровня кислотности через 1, 3,5 и 24 часа после обработки (рисунок 2). Из графика видно, что с течением времени кислотность суспензий продолжает меняться и принимает стабильное значение через примерно 3,5 часа. При этом во всех случаях наблюдалась одинаковая тенденция в сравнении с уровнем кислотности, полученным через 1 час после обработки. Кислотность суспензий приготовленных из порошков, время обработки которых менее 6 минут, продолжает расти, а для остальных порошков кислотность начинать снижаться. Для выявления природы данного эффекта требуются дополнительные исследования.

Заключение. На основании полученных результатов можно сделать следующие выводы. Плазменная обработка приводит к увеличению гидрофильных свойств микродисперсного порошка диоксида циркония, что является естественным следствием повышения химической активности. Можно прогнозировать, что увеличение химической активности приведет к увеличению плотности и твердости керамики спеченной из обработанного порошка, что может быть принципиально важно для получения керамических изделий с градиентной структурой, например, костных имплантатов, которые имеют более плотный и твердый внешний слой, и высокопористую внутреннюю часть.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Буякова С.П., Хлусов И.А., Кульков С.Н. Пористая циркониевая керамика для эндопротезирования костной ткани. // Физическая мезомеханика – 2004 – № 7 Спец. выпуск Ч. 2 – С. 127-130
2. Иконникова К.В. и др. Теория и практика pH-метрического определения кислотно-основных свойств поверхности твердых тел. – Томск. Изд. Томского политехнического университета, 2011. – 85 стр.
3. Иконникова К.В. и др. Оценка влагопоглощающей способности железооксидных пигментов методом pH-метрии // Фундаментальные исследования. – 2015. – №2. – С. 2134-2137.
4. Szalay Z. Atmospheric pressure air plasma treated alumina powder for ceramic sintering // Ceramics International. – 2014. – pp. 12737–12743

ВЛИЯНИЕ МОЩНОГО УЛЬТРАЗВУКОВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ В ПРОЦЕССЕ ПРЕССОВАНИЯ НА СТРУКТУРУ КЕРАМИКИ ИЗ ОКСИДА ЦИНКА

Т.Р. Алишин, О.С. Толкачёв
Научный руководитель: д.ф-м.н. наук Э.С. Двилис
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 2, 634028

THE INFLUENCE OF POWERFUL ULTRASONIC ACTION DURING COMPACTION ON STRUCTURE ZINC OXIDE CERAMICS

T.P. Alishin, O.C. Tolkachev
Scientific Supervisor: Dr. Sci. in Physics and Mathematics E.S. Dvilis
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 2, 634028
E-mail: alishin.95@mail.ru

Abstract. *This paper reports an investigation of the influence of powerful ultrasonic action during compaction on porosity and pore size distribution in ZnO ceramics. Ceramic samples were obtained with a porosity of ~ 1%. It was established that ultrasonic action, without significantly changing the integral value of the porosity of sintered samples, leads to decrease in the relative content of large pores (macrodefects).*

Введение. Прозрачные проводящие покрытия используются при производстве различных оптоэлектронных приборов и устройств: органических светодиодов, жидкокристаллических дисплеев, сенсорных экранов и др. В качестве основных материалов для производства таких покрытий используются оксиды металлов (InO 2:Sn, SnO 2:F, ZnO), нановолокна серебра, металлические микросетки (медь, серебро, золото), графен, проводящие полимеры и углеродные нанотрубки. [1]. Одним из перспективных материалов для создания прозрачных проводящих покрытий является оксид цинка, обладающий низким удельным электрическим сопротивлением, удовлетворительными оптическими свойствами [2].

В производстве прозрачных проводящих покрытий из оксида цинка широко применяется методы распыления. Для формирования качественной микроструктуры и свойств таких покрытий критичным являются параметры пористости и однородности мишени, используемой для распыления, поэтому их изготавливают с применением дорогих и сложных технологических процессов (многостадийная консолидация с использованием холодного и горячего изостатического прессования, электроимпульсного плазменного спекания и т.п.), обеспечивающих высокую плотность и однородность структуры [3].

Более экономичными, но не утратившими потенциал развития, являются методы холодного прессования в закрытых жёстких пресс-формах с усовершенствованными кинематическими схемами перемещения формообразующих элементов, а также используемых в сочетании с внешним энергетическим воздействием. Таковыми являются разработанные нами рациональные методы и приёмы консолидации: коллекторное и ультразвуковое прессование, реализация которых позволяет минимизировать перепады плотности по объему порошковой прессовки [4].

Цель данной работы – оценить влияние ультразвукового воздействия (УЗВ) в процессе коллекторного прессования порошка ZnO на пористость и распределение пор по размерам в спечённой керамике.

Материал и методики экспериментов. В качестве исходного материала использовали порошок ZnO высокой чистоты (Leshan KaiYaDa Photoelectric Technology Co., Ltd., Китай, содержание основного компонента 99,999 %). По данным производителя, средний размер частиц порошка составляет 0,3 мкм. Исходный порошок характеризуется низкой насыпной плотностью (0,5 г/см^3, что составляет ~9 % от теоретической плотности 5,606 г/см^3) и, соответственно, высоким коэффициентом упрессовки. Для эффективного прессования порошка в коллекторной пресс-форме (КП) провели в оптимизированных условиях его сухую грануляцию, которая позволила повысить насыпную плотность до ~25 %. Для изготовления прессовок использовали комбинированную ультразвуковую коллекторную пресс-форму (КП+УЗ), колебания частотой около 18 кГц в которой возбуждали магнитострикционными преобразователями типа ПМС-15. Для возбуждения колебаний использовали ультразвуковой генератор УЗГ-2-4М (Россия); прессование проводили в испытательном прессе ИП-500М-авто (ЗИПО, Россия) давлением 75 МПа, выбранном на основе серии экспериментов по критерию достижения максимальной плотности керамики. Спекание спрессованных образцов проводили в высокотемпературной атмосферной печи LHT 08/18/P310 (Nobertherm, Германия) с выдержкой в течении 5 ч при температуре 1150 ^{0}C и скоростью изменения температуры 200 ^{0}/ч. Распределение пор по размерам оценивали методом ртутной порометрии на приборе Poremaster 33 (Quantachrome, США) с диапазоном измеряемых значений размеров пор от 7 нм до 1000 мкм.

Результаты исследования и их обсуждение. Результаты определения плотности образцов методом взвешивания и геометрического измерения объёма показали, что ультразвуковое воздействие в процессе прессования способствует снижению пористости на 1,4 % (с 45,2 до 43,9 %). После спекания пористость озвученных образцов оказалась в среднем на 0,4 % выше, однако находится в достаточно узком диапазоне значений (от 0,1 до 1,5 % в обоих случаях).

На поверхности скола керамики (рис, 1 а) наблюдается незначительное количество остаточных пор, а также смешанный характер разрушения (около половины зёрен на изображении обнаруживают транскристаллитное разрушение). На полированной поверхности возникают углубления от зерен, вырванных абразивом. Эти углубления в совокупности со смешанным характером разрушения материала на сколе (рис. 1, а) свидетельствуют о прочности межзёренных связей, сопоставимой с прочностью самих зерен.

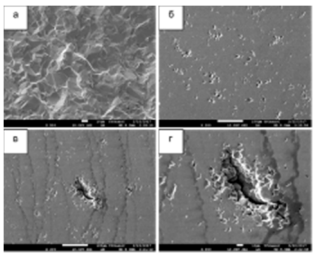


Рис. 1. – Структурные элементы и морфологические особенности на поверхностях скола (а) и на полированных поверхностях (б, в, г) керамики ZnO, изготовленной обычным статическим прессованием (в, г) и прессованием под действием УЗ-колебаний (а, б)

Результаты ртутной порометрии спеченных образцов (рис. 2) показали, что ультразвуковое воздействие в процессе прессования, не оказывая существенного влияния на интегральное значение плотности, приводит к изменению характера распределения пор по размерам. В керамике, изготовленной с применением УЗВ, наблюдается меньшее содержание пор микронных размеров и существенное увеличение содержания нанопор, чем в неозвученном материале.

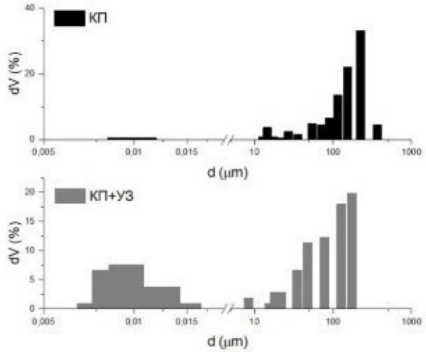


Рис. 2. – Относительное объёмное распределение пор по размерам в образцах керамики ZnO, изготовленной обычным статическим прессованием (КП) и прессованием под действием УЗ-колебаний (КП+УЗ)

Заключение. В результате исследований установлено, что ультразвуковое воздействие, существенно не меняя интегрального значения пористости спеченных изделий, приводит к уменьшению относительного содержания крупных пор (макродефектов). Обнаруженная особенность позволяет рассматривать используемые нами методы консолидации для повышения качества керамических мишеней не столько за счёт снижения интегральной пористости, сколько путём смещения размеров пор в некритичную для технологии напыления область (в наноразмерный диапазон).

Работа выполнена в рамках Госзадания “Наука” (проект № 11.7700.2017/БЧ) при частичной поддержке проекта РФФИ № 16-08-00831.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Т.Н. Патрушева, Н.Ю. Снежко, Ф.В. Барон. Прозрачные проводящие пленки для СВЧ электроники // Электроника и микроэлектроника СВЧ. – 2015. - №1-2, - С. 73-76.
2. Вакулов Д.Е., Вакулов З.Е., Замбург Е.Г., Ивонин М.Н., Шумов А.В. Получение прозрачных проводящих нанокристаллических пленок оксида цинка методом импульсного лазерного осаждения // Фундаментальные исследования. – 2012. – № 11-2. – С. 373-376;
3. Е.К. Папынов, О.О. Шичалин, В.Ю. Майоров. Технология искрового плазменного спекания как перспективное решение для создания функциональных наноструктурированных керамик // Химия. Перспективные материалы и методы. – 2016. - № 6. – С. 15-30.
4. Метод коллекторного компактирования нано- и полидисперсных порошков: учебное пособие / О.Л. Хасанов, Э.С. Двилис, А.А. Качаев; Томский политехнический университет. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2009. – 99 с.

СЕНСОРЫ ВОДОРОДА НА ОСНОВЕ ТОНКИХ ПЛЕНОК ДИОКСИДА ОЛОВА С ДОБАВКАМИ Y И Ag В ОБЪЕМЕ В РЕЖИМЕ ТЕРМОЦИКЛИРОВАНИЯ

А.В. Алмаев

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. В.И. Гаман

Национальный исследовательский Томский государственный университет,

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

E-mail: almaev_alex@mail.ru

HYDROGEN SENSORS BASED ON THIN FILMS OF TIN DIOXIDE WITH ADDITIVES OF Y AND Ag IN THE BULK IN THE THERMO-CYCLIC OPERATION MODE

A.V. Almaev

Scientific Supervisor: Prof., Dr. V.I. Gaman

Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenina ave., 36, 634050

E-mail: almaev_alex@mail.ru

Abstract. *In this paper the possibility of estimation of the value of energy band bending at intergrain boundaries in SnO_2 with additives of Y and Ag in the bulk is discussed. The modification of thin film of tin dioxide by additives of Y and Ag leads to the formation of developed surface and to increase energy band bending. As a result researched samples are characterized by high value of response to hydrogen.*

Согласно работе [1], для детектирования низких концентраций водорода (<1 об. %) в воздухе целесообразнее использовать сенсоры на основе тонких плёнок диоксида олова с нанесенными на поверхность мелкодисперсными слоями Pt/Pd. За счет каталитической активности слоёв платины и палладия обеспечивается высокий отклик на воздействие водорода, быстродействие на уровне нескольких секунд и низкие рабочие температуры сенсоров [1]. Однако, характеристики сенсоров водорода на основе плёнок диоксида олова подвержены дрейфу при долговременных испытаниях и сильно зависят от колебаний уровня влажности атмосферы [2]. Кроме того, интерес представляет повышение селективности приборов, способности распознавать целевой газ в смеси, и снижение потребляемой энергии. Решить данные проблемы можно при модификации материала чувствительного элемента сенсора добавками металлов в объеме и с использованием режима термоциклирования при работе сенсора. О преимуществах циклического изменения рабочей температуры газовых сенсоров можно ознакомиться в деталях в работах [3, 4]. Из предварительных данных установлено, что введение добавок иттрия и серебра в объем пленок диоксида олова приводит к снижению дрейфа приборов при долговременных испытаниях и также к уменьшению влияния влажности. Необходимость поиска новых материалов отличающихся высокой чувствительностью к газам и стабильностью при эксплуатации в реальных условиях, вызывает интерес к исследованию влияния новых типов катализаторов на характеристики сенсоров. Таким образом, целью настоящей работы является исследование характеристик сенсоров водорода на основе тонких плёнок диоксида олова с добавками иттрия и серебра в объёме и с дисперсными слоями Pt/Pd и Ag на поверхности при работе в режиме термоциклирования.

Объектом исследований являются сенсоры из двух серий: i – Pt/Pd/SnO_2:Sb, Ag, Y и ii – Ag/SnO_2:Sb, Ag, Y. Пленки SnO_2 были получены методом магнетронного распыления на постоянном токе в кислородо-аргоновой плазме мишени, которая представляла собой сплав олова с сурьмой (0,51 ат.% Sb). Сурьма является мелкой донорной примесью. В качестве подложки использовались пластины сапфира толщиной 150 мкм. Для введения добавок в объем пленок на поверхности мишени размещали кусочки соответствующего металла. Содержание добавок в объеме SnO_2 оценивалось отношением площадей распыляемой мишени S_{Sn} и поверхности кусочков металлов S_M (M = Ag, Y), $S_{Ag}/S_{Sn}=3\times10^{-3}$ и $S_Y/S_{Sn}=3\times10^{-3}$. Для формирования поликристаллической структуры готовые, аморфные, образцы подвергали отжигу в воздухе при температуре $T_{отж}=723$ *K* в течение 24 часов. После отжига на поверхности пленок SnO_2 формировали дисперсные слои Pt/Pd и Ag тем же методом магнетронного напыления на постоянном токе. Для партии i сначала наносили Pd, затем Pt.

При помощи атомно-силовой микроскопии установлено, что исследуемые пленки, толщиной 120–150 нм, обладают развитой структурой поверхности, которая представлена двумя типами нанокристаллов с характеристическими размерами d_1=12–14 нм и d_2=32–35 нм, а также крупными агломератами размером d_3=150–185 нм. Так как дисперсные слои Pt/Pd и Ag были нанесены после отжига, то их влияние на структуру плёнок SnO_2 исключено. Мелкий размер нанокристаллов и развитая поверхность приводят к увеличению центров адсорбции для кислорода, что в свою очередь обеспечивает высокую чувствительность сенсоров к воздействию восстановительными газами.

Из анализа временной зависимости проводимости сенсора в режиме термоциклирования в атмосфере чистого воздуха, представленной на рисунке 1, можно вычислить величину изгиба энергетических зон $e\varphi_s$ на границе раздела нанокристаллов SnO_2 в поликристаллической плёнке диоксида олова согласно методу, описанному в работе [3], где e – заряд электрона; φ_s – поверхностный потенциал. Согласно теории [3] $G_0 \sim \exp(-e\varphi_s)$ и $G_H/G_0 \sim \exp(e\varphi_s)$, где G_0 – проводимость сенсора в атмосфере чистого воздуха; G_H – проводимость сенсора в атмосфере содержащей H_2; G_H/G_0 – отклик сенсора на воздействие водорода. Величина $e\varphi_s$ является основным фактором определяющим зависимость характеристик сенсоров от концентрации газа, рабочей температуры и влажности.

Из анализа температурной зависимости отклика на воздействие 100 ppm водорода установлено, что температура максимального отклика T_{MAX}, составляет 673 *K* для сенсоров серии i и 750 *K* для сенсоров серии ii. В качестве температуры нагрева T_2 целесообразнее выбрать температуры T_{MAX}, но для приборов из второй серии $T_{MAX}>T_{отж}$, работа прибора при такой температуре приводит к необратимому дрейфу характеристик. Поэтому для образцов из обеих серий T_2=673 *K*. Для устранения возможного влияния изменения химического состава добавок серебра при изменении температуры от T_1 до T_2, T_1 для серии i составляла 503 *K*, для серии ii – 523 *K*. Длительность цикла нагрева – 19 с, цикла охлаждения – 6с.

Изгиб энергетических зон при относительной влажности 35 % для серии i равен 0,70 эВ, для серии ii – 0,66 эВ. Высокие значения $e\varphi_s$ обусловлены увеличением поверхностной плотности хемосорбированного кислорода за счет введения добавок иттрия и серебра в объем плёнок SnO_2 и наличия каталитических слоев на поверхности плёнок. Стоит отметить, что для сенсоров на основе Pt/Pd/SnO_2:Sb $e\varphi_s$ в период стабильности характеристик составляет 0,51 эВ, а для сенсоров на основе Au/SnO_2: Sb, Au – 0,37 эВ [2, 5]. Спад проводимости в интервале 1–17 с на кривых рисунка 1 обусловлен

десорбцией гидроксильных групп с последующей адсорбцией атомарного кислорода на освободившиеся центры адсорбции. Незначительный рост G_0 при t>21 с вызван десорбцией атомарного кислорода и адсорбцией ОН-групп.

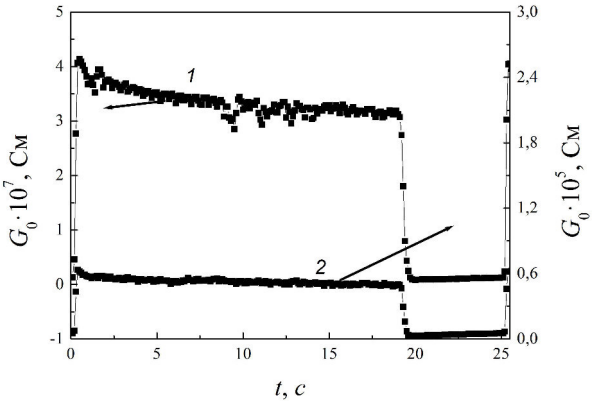


Рис. 1. Временная зависимость проводимости сенсоров партии i – кривая 1, партии ii – кривая 2 в режиме термоциклирования

Таким образом, помимо снижения дрейфа характеристик при длительных испытаниях, модификация объема тонких поликристаллических пленок SnO_2 добавками иттрия и серебра приводит к образованию развитой структуры поверхности и к увеличению $e\varphi_s$. Для исследуемых плёнок имеет место повышение поверхностной плотности хемосорбированного кислорода, который является центром адсорбции для водорода. Поэтому исследуемые приборы отличаются высокими откликами.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Севастьянов Е.Ю., Максимова Н.К., Новиков В.А., Рудов Ф.В., Сергейченко Н.С., Черников Е.В. Влияние добавок Pt, Pd, Au на поверхности и в объеме тонких пленок диоксида олова на электрические и газочувствительные свойства // Физика и техника полупроводников. – 2012. – Т. 46. – №. 6 – С. 820-828.
2. Gaman V.I., Almaev A.V., Maksimova N.K. Stability of characteristics of resistive hydrogen sensors based on thin tin dioxide films with deposited catalysts Pt and Pd // International Siberian Conference on Control and Communications (SIBCON–2015). Proceedings. – Omsk, 2015. P. 1-4. 1 электрон. опт. диск (CD-R).
3. Гаман В.И., Севастьянов Е.Ю., Максимова Н.К., Алмаев А.В., Сергейченко Н.В. Характеристики полупроводниковых резистивных сенсоров водорода при работе в режиме термоциклирования // Известия ВУЗов. Физика. – 2013. – Т.56. – №12. – С.96-102.
4. Korotcenkov G., Cho B.K. Engineering approaches for the improvement of conductometric gas sensor parameters. Part 1: Improvement of sensor sensitivity and selectivity (short survey) // Sensors and Actuators B. – 2013. – V.188. – P.709-728.
5. V.I. Gaman, N.K. Maksimova, A.V. Almaev, N.V. Sergeychenko. Effect of humidity on characteristics of hydrogen sensors based on nanocrystalline SnO_2 thin films with various catalysts // Key Engineering Materials. – 2016. – Vol. 683. – P. 353-357.

ПЛАЗМОХИМИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ ОКСИДНЫХ КОМПОЗИЦИЙ ДЛЯ ДИСПЕРСИОННОГО ЯДЕРНОГО ТОПЛИВА

Е.С. Алюков, И.Ю. Новоселов
Научный руководитель: доцент каф. ТФ ФТИ, 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

PLASMACHEMICAL SYNTHESIS OF OXIDE COMPOSITIONS FOR DISPERSION NUCLEAR FUEL

E.S. Alyukov, I.Yu. Novoselov
Scientific Supervisor: Ass. Prof., PhD A.G. Karengin
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050
E-mail: john.judo@mail.ru

Abstract. *Article represents results on simulation of plasma treatment of mixed nitric solutions in form of water-salt-organic compositions. Authors defined optimal content of water-salt-organic composition and operational modes providing direct plasmachemical synthesis of oxide compositions for dispersion nuclear fuel. All calculated results were confirmed experimentally.*

Введение. У современной атомной энергетики, использующей оксидное ядерное топливо в реакторах на тепловых нейтронах (РТН) в виде керамики из диоксида урана, обогащенного по изотопу уран-235, наряду с несомненными достоинствами есть и существенные недостатки: низкая теплопроводность, которая ограничивает удельную мощность реактора по температуре плавления; горячая керамика очень хрупка и может растрескиваться; короткий цикл использования; невозможность создания энергетических установок малой (10-100 МВт) и сверхмалой мощности (до 10 МВт); большие расходы на утилизацию отработавшего топлива; ограниченный ресурс изотопа уран-235. Это стало причиной замедления в последние годы развития атомной энергетики на базе РТН и привело к отказу от нее в ряде стран. Одним из перспективных направлений дальнейшего развития атомной энергетики является создание реакторных установок с использованием дисперсионного ядерного топлива (ДЯТ), в котором гранулированные оксидные композиции из ядерных материалов (уран, плутоний, торий и др.) размещают в матрице (алюминий, молибден, нержавеющая сталь и др.) [1]. При использовании изотопов уран-238, торий-232 и плутоний-239 отпадает необходимость в дорогостоящем изотопном обогащении, а цикл использования топлива может быть доведен до 10-15 лет. С учетом ограниченности ресурса изотопа уран-235 использование тория в составе ДЯТ открывает новые перспективы. Применение ДЯТ с использованием тория дает возможность создания малых и сверхмалых энергетических установок для использования в удаленных и труднодоступных районах России, а также на рудниках и карьерах, где после выработки их можно захоронить. Однако у ДЯТ есть и существенные недостатки: паразитное поглощение нейтронов материалом матрицы, что существенно ухудшает нейтронный баланс топлива; необходимость применять высокообогащенные делящиеся материалы, что повышает риск появления

критических масс топлива в сценариях тяжелых аварий с проплавлением активной зоны реактора. Кроме того, применяемая технологическая схема получения гранулированных оксидных композиций для ДЯТ из смесевых нитратных растворов (СНР) методом внешнего гелеобразования (золь-гель процесс) включает целый ряд длительных и трудоёмких стадий и требует значительных количеств химических реагентов [2]. Получение оксидных композиций из СНР с применением плазмы обладает многими важными особенностями, выгодно отличающими от технологии, основанной на механическом смешении компонентов: возможность получения гомогенного распределения фаз и заданного стехиометрического состава во всем объеме, чистота материала, возможность активно влиять на морфологию частиц [3]. Однако, плазменная обработка только СНР требует огромных энергозатрат (до 2-4 МВт·ч/т). Плазменная обработка СНР в виде диспергированных водно-солеорганических композиций (ВСОК), имеющих необходимую низшую теплотворную способность и адиабатическую температуру горения, дает возможность прямого плазмохимического синтеза в воздушно-плазменном потоке гомогенных композиций с требуемым физико-химическими свойствами и обеспечивает не только существенное снижение затрат электрической энергии на обработку СНР (до 0,1 МВт·ч/т), но и дополнительное получение тепловой энергии для технологических и бытовых нужд (до 2 МВт·ч/т) [4].

Теоретическая часть. Жидкими горючими композициями считают композиции с низшей теплотворной способностью свыше 8,4 МДж/кг [5]:

$$Q_{\text{н}}^{\text{р}} = \frac{(100 - W - A)Q_{\text{н}}^{\text{с}}}{100} - \frac{2,5W}{100},$$

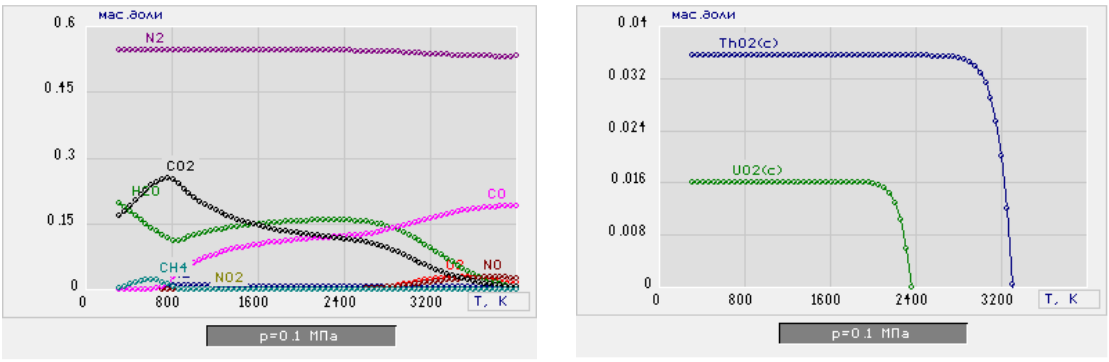
где $Q_{\text{н}}^{\text{с}}$ – низшая теплотворная способность горючего компонента композиции, МДж/кг; W и A – содержание соответственно воды и негорючих минеральных веществ в композиции, %; 2,5 – скрытая теплота испарения воды при 0 °С, МДж/кг.

В результате проведенных расчетов определены оптимальные по составу ВСОК на основе СНР урана и тория, этанола (C_2H_6O) и ацетона (C_3H_6O), имеющих $Q_{\text{н}}^{\text{р}} \geq 8,4$ МДж/кг:

1. При исходном соотношении U/(U+Th) в СНР, равном 0,1
   - ВСОК-1 (3,6 % $UO_2(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$: 39,3 % $Th(NO_3)_4 \cdot 6H_2O$: 23,1% H_2O : 34 % C_2H_6O);
   - ВСОК-2 (3,9 % $UO_2(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$: 42,3 % $Th(NO_3)_4 \cdot 6H_2O$: 24,9 % H_2O : 29 % C_3H_6O).
2. При исходном соотношении U/(U+Th) в СНР, равном 0,3:
   - ВСОК-3 (11,3% $UO_2(NO_3)2 \cdot 6H_2O$: 31,6% $Th(NO_3)_4 \cdot 6H_2O$: 23,1% H_2O : 34 % C_2H_6O);
   - ВСОК-4 (12,1% $UO_2(NO_3)2 \cdot 6H_2O$: 34,0% $Th(NO_3)_4 \cdot 6H_2O$: 24,9% H_2O : 29 % C_3H_6O.

Для определения оптимальных режимов исследуемого процесса проведены расчёты равновесных составов газообразных и конденсированных продуктов плазменной обработки оптимальных по составу ВСОК в воздушной плазме. Для расчётов использовалась лицензионная программа «TERRA». Расчёты проведены при атмосферном давлении (0,1 МПа), широком диапазоне рабочих температур (300–4000) К и для различных массовых долей воздушного плазменного теплоносителя (10–90) %.

На рисунке 1 представлены характерные равновесные составы основных газообразных (а) и конденсированных (б) продуктов плазменной обработки ВСОК-4 на основе СНР и этанола при массовой доле воздуха 70 % и исходном соотношении U/(U+Th) в СНР, равном 0,3.



а) *б)*

Рис. 1. Влияние температуры на равновесный состав газообразных (а) и конденсированных (б) продуктов плазменной обработки ВСОК-4 в воздушной плазме: (70 % Воздух : 30 % ВСОК-4)

Из анализа равновесных составов следует, что при плазменной обработке ВСОК-4 с массовой долей воздуха 70 % основными газообразными продуктами при температурах до 2000 K являются N_2, CO_2 и H_2O, а в конденсированной фазе образуется требуемая оксидная композиция «UO_2–ThO_2». Отсутствие сажи C(c) и низкое содержание CO, NO и NO_2 указывает на то, что процесс идет в оптимальном режиме с получением в конденсированной фазе требуемой оксидной композиции «UO_2–ThO_2». Изменение исходного соотношения U/(U+Th) в СНР с 0,1 до 0,3 не оказывает существенного влияния на состав газообразных и конденсированных продуктов, а снижение массовой доли воздуха ниже 70 % также не оказывает существенного влияния на состав газообразных продуктов, но приводит к образованию в конденсированной фазе оксидной композиции «U_3O_8–ThO_2».

Заключение. С учётом полученных результатов может быть рекомендованы для практической реализации процесса плазменной обработки СНР урана и тория в воздушной плазме следующие оптимальные режимы: состав композиции ВСОК-4; массовое отношение фаз (70 % Воздух : 30 % ВСОК-4); рабочая температура (1500 ± 100) К; удельные энергозатраты 39,0 МДж/кг.

Результаты проведенных исследований могут быть использованы при создании технологии энергоэффективного плазмохимического синтеза гомогенных оксидных композиций для ДЯТ из смесевых нитратных растворов в виде оптимальных по составу водно-солеорганических композиций.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Бойко В.И, Власов В.А., Жерин И.И., Маслов А.А., Шаманин И.В. Торий в ядерном топливном цикле. – М.: Издательский дом «Руда и металлы», 2006. – 360 с.
2. Туманов Ю. Н., Бутылкин Ю. П., Коробцев В. П., Бевзюк Ф. С, Грицюк В.Н., Батарее Г. А., Хохлов В. А., Галкин Н.П. Способ получения урансодержащих смесевых оксидов. – Авт. свидетельство СССР № 904393, 1976.
3. Туманов Ю.Н., Плазменные и высокочастотные процессы получения и обработки материалов в ядерном топливном цикле. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003. – 760 с.
4. Karengin A.G., Karengin A.A., Novoselov I.Y., Tundeshev N.V. Calculation and Optimi-zation of Plasma Utilization Process of Inflammable Wastes after Spent Nuclear Fuel Recycling // Advanced Materials Research. – 2014. – Vol. 1040. – P. 433–436.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ЗАЖИГАНИЯ КАПЕЛЬ ОРГАНОВОДОУГОЛЬНОГО ТОПЛИВА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ANSYS FLUENT

Д.В. Антонов

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

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: dva14@tpu.ru

MATHEMATICAL MODELING OF PROCESSES IGNITION ORGANIC WATER-COAL FUEL DROPS WITH THE USE OF ANSYS SOFTWARE PACKAGE

D.V. Antonov

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

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

E-mail: dva14@tpu.ru

Abstract. *The mathematical model provides a fairly accurate reproduction of the experimental values of the integral characteristics (temperature, delay times, the coordinates of the birth of the flame front) ignition of organic water-coal fuel (CWSP) in high-temperature gases. Numerical research of ignition of organic water-coal fuel processes based on the typical waste coals - filter cakes, industrial (turbine, engine, transformer) oils and water. Set the ignition delay time drops CWSP with variation size (radius) drops from 0.25 mm to 1.5 mm, speed from 0.5 m/s 3 m/s, and temperature gases from 700 K to 1000 K. A satisfactory agreement of the results experimental data and mathematical modeling.*

Введение. Почти 80 % выбросов CO_2, оксидов серы и азота приходятся на энергетические объекты – установки, предназначенные для сжигания жидких, твердых и газообразных топлив. Нужно решать проблемы парниковых выбросов, в первую очередь, в теплоэнергетике. Анализ работ [1–3] показывает, что более 40 % теплоэлектростанций и других энергетических установок по всему миру работают на твердом топливе (угли разного качества) и нет возможности по целому ряду объективных причин их перевести на другие виды топлив. Именно твердые топлива – самые опасные с точки зрения экологических последствий [1–3], но и самые востребованные на ближайшие десятилетия.

Одними из основных проблем, сдерживающих развитие технологий ВУТ и ОВУТ во всем мире, являются довольно сложные комплексы взаимосвязанных физико-химических процессов, протекающих при зажигании и горении водоугольных композиций. Актуальны фундаментальные представления об этих процессах.

Для моделирования процессов зажигания капель ВУТ в последние годы активно используются несколько подходов: с применением собственных программных кодов или коммерческих пакетов математического моделирования. У каждого из таких подходов есть преимущества и недостатки. Для ОВУТ адекватные математические модели зажигания пока не разработаны. Это можно объяснить достаточно существенным усложнением процессов химического реагирования органоводоугольных топлив по сравнению с ВУТ, а также условий прогрева и испарения топливных суспензий.

Цель настоящей работы – разработка математической модели в пакете Ansys Fluent для прогностического исследования интегральных характеристик зажигания одиночных капель органоводоугольного топлива в потоке высокотемпературного окислителя.

Математическая модель и метод решения. В соответствии с экспериментальными результатами [4, 5] разработана модель, описывающая процесс зажигания одиночной капли ОВУТ в потоке окислителя (рис. 1). При моделировании учитывались установленные в опытах [4, 5] последовательные стадии зажигания капли ОВУТ, в частности: прогрев приповерхностного слоя, испарение влаги и выход летучих; газофазное зажигание смеси летучих и паров горючей жидкости, прогрев углеродного остатка; гетерогенное зажигание углеродного остатка и распространение фронта гетерогенного горения по всей поверхности частицы топлива; интенсивное выгорание углерода; завершение выгорания углерода с движением фронта завершения горения от фронтальной части капли к тыльной (относительно потока окислителя); инертный прогрев зольного остатка в потоке окислителя.

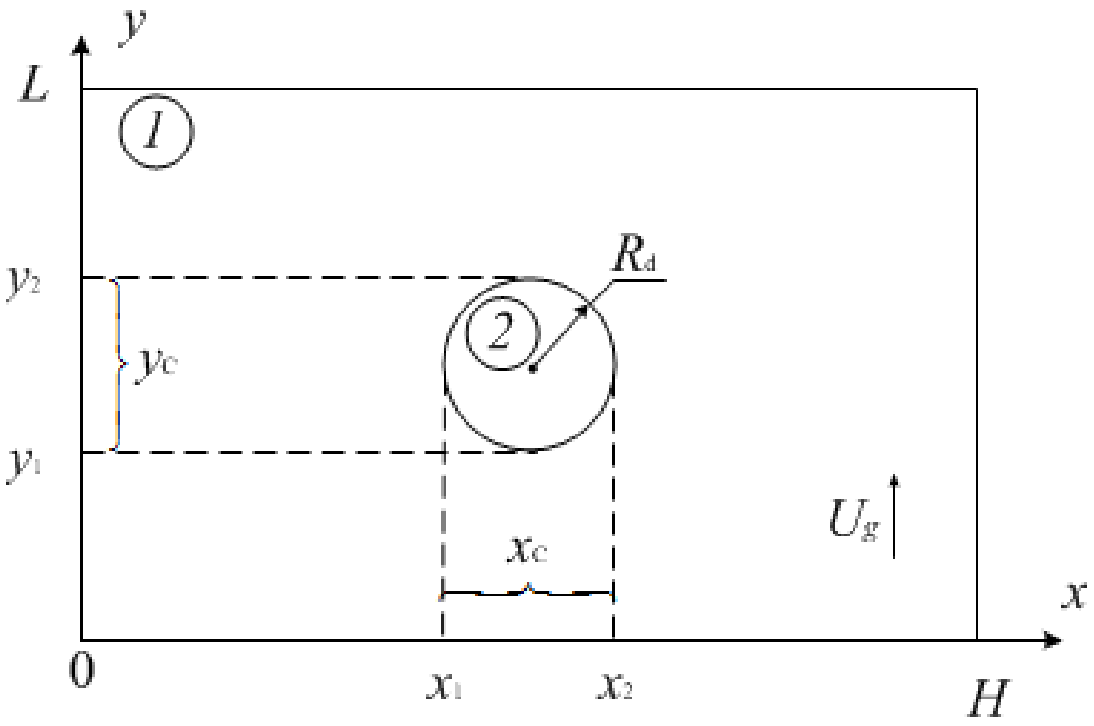


Рис. 1. Схема области решения задачи для моделирования зажигания капли ОВУТ: 1 – поток окислителя, 2 – капля

Результаты и обсуждения. В качестве иллюстрации основных результатов выполненных теоретических исследований на рис. 2 представлены температурные поля в рассматриваемой системе (рис. 1), которые соответствуют перечисленным выше стадиям процесса зажигания. Детализация стадий зажигания выполнялась аналогично экспериментам [4, 5]. В результате численного моделирования установлено (рис. 2), что гетерогенное зажигание капли ОВУТ происходит на участке ее поверхности со стороны набегающего потока. Можно сделать обоснованный вывод о зарождении очага горения в этой области. Затем по направлению движения потока окислителя происходит распространение фронта горения. Аналогичные результаты получены при обработке видеограмм опытов [4, 5].

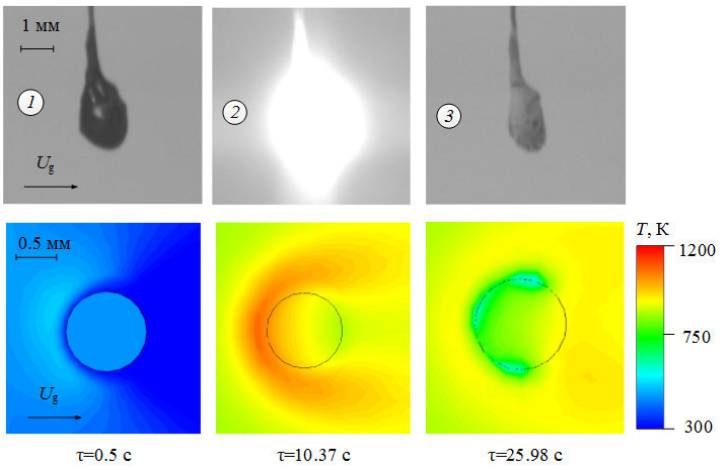


Рис. 2. Рассчитанные температурные и концентрационные поля, а также кадры видеограмм [4, 5] при прогреве, зажигании и горении ОВУТ в потоке окислителя (сравнение экспериментальных [4, 5] и теоретических результатов исследований): 1 – натекание разогретого потока окислителя на каплю; 2 – прогрев приповерхностного слоя капли, испарение влаги и выход летучих; 3 – газофазное зажигание смеси летучих и паров горючей жидкости, прогрев углеродного остатка; 4– гетерогенное зажигание углеродного остатка и распространение фронта гетерогенного горения по всей поверхности обезвоженной капли топлива; 5 – интенсивное выгорание углерода; 6 – завершение процесса выгорания углерода

Заключение. В пакете Ansys Fluent впервые разработана математическая модель, обеспечивающая адекватное воспроизводство экспериментальных значений интегральных характеристик зажигания капель органоводоугольных топлив (различных по составу суспензий на основе частиц угольных компонентов, воды и отработанных жидких горючих компонентов) в потоке разогретого окислителя.

«Исследования выполнены за счет средств Российского научного фонда (проект № 15-19-00003)»

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Савицкий Д.П., Егурнов А.И., Макаров А.С., Завгородний В.А. Жидкое топливо на основе угольных шламов и бурого угля // Энерготехнологии и ресурсосбережение. – 2009. – № 1. – С. 13–17.
2. Трубецкой К.Н., Зайденварг В.Е., Кондратьев А.С., Мурко В.И., Кассихин Г.А., Нехороших И.Х. Водоугольное топливо – результаты разработки и перспективы применения в России // Теплоэнергетика. – 2008. – № 5. – С. 49-52.
3. Горлов Е.Г. Композиционные водосодержащие топлива из углей и нефтепродуктов // Химия твердого топлива. – 2004. – № 6. – С. 50-61.
4. Вершинина К.Ю., Глушков Д.О., Кузнецов Г.В., Стрижак П.А. Отличия характеристик зажигания водоугольных суспензий и композиционного жидкого топлива // Химия твердого топлива. – 2016. – № 2. – С. 21-33.
5. Вершинина К.Ю., Кузнецов Г.В., Стрижак П.А. Влияние технологии приготовления органоводоугольных топлив на характеристики их зажигания // Кокс и химия. – 2016. –№ 4. – С. 8-17.

КРАЕВЫЕ ЭФФЕКТЫ ИЗМЕНЕНИЯ КОНЦЕНТРАЦИИ ВОДОРОДА В НАВОДОРОЖЕННОМ ЦИРКОНИЕВОМ СПЛАВЕ

А.А. Асхатов

Научный руководитель: профессор В.В. Ларионов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: askhatov10@mail.ru

EDGE EFFECT CHANGE IN THE CONCENTRATION OF HYDROGEN-ZRCONIUM ALLOY

A.A. Askhatov

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

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

E-mail: askhatov10@mail.ru

Abstract. *The influence of the geometric dimensions of the samples zirconium alloy Zr-1Ni-H when irradiated with X-rays on the amount of energy absorbed. Small samples or articles of zirconium absorb less x-ray quanta. The amount of absorbed energy is changed to 30-35% of the incident flux of X-rays. With the increase in cross-section of the product share of the absorbed energy is increased in proportion to a constant thickness. This effect is attributed to multiple scattering of X-rays. It leads to an uneven distribution of defects that can store hydrogen. heterogeneity of measurement conducted by the thermopower. The value of the thermoelectric power changes by more than 1.6 times. it depends on the amount of hydrogen in the sample, the dimensions and coordinates of the sample probe on the sample.*

Введение. Циркониевые сплавы используются в высокотехнологичных узлах и устройствах атомных электростанций. Долговечность и надежность узлов определяется способностью материала труб выдерживать механические нагрузки и облучение в условиях технологического наводороживания. При этом они активно поглощает водород даже при 300 °C, образуя твёрдый раствор и гидриды ZrH и ZrH_2. При облучении возникают радиационные дефекты, которые неравномерно [1] распределены по объему. Целью данной работы является изучение краевых эффектов наводороженных образцов сплава циркония термоэлектрическими методами.

Материалы и методы. Изучены образцы сплава Zr 1% Ni прямоугольной формы 20 х 20 мм толщиной 1 мм и в форме диска радиусом 2 см и толщиной 2 мм. Насыщение образцов водородом осуществлялось на установке PCI_ «Gas Reaction Controller» по методу Сивертса при температурах T = 450 – 600^{0}C, давлении 0.66 atm. Отжиг производили при 650 ^{0}C 8 часов со скоростью 2 ^{0}C/ мин. Концентрация водорода варьировалась от C = 690 до C=5000 ppm. Ее величина измерена на приборе RHEN 602 (LECO). При этом использованы результаты [2, 3]. Облучение R-квантами проводилось на ИРТ -2000 ТПУ различными дозами R-квантов до 2,6.10^{18} R-кв./см^2. При изучении структуры сплава использовался метод сканирующей электронной микроскопии. Термоэдс измеряли на приборе Т-3СП вольтметром В7-78/1. Термозонд изготовлен из золотого стержня диметром 1 мм.

Результаты. Анализ поглощения R-квантов с энергией 80 кэВ проведен по модели Горячева-Ларионова [1]. Расчеты выполнены для следующих исходных данных: геометрические размеры образца-

мишени y_0, z_0, $x_o = d$, коэффициент ослабления $\mu(E)$, полное сечение поглощения при комптоновском рассеянии Σ^h_g и фотоэффекте Σ^f_g, полное сечение рассеяния Σ_s, интегральная ≪эффективная≫ вероятность выживания рентгеновского фотона при комптоновском рассеянии $\Lambda_k = \Sigma_s / (\Sigma_s + \Sigma^k_g)$, интегральная ≪эффективная≫ вероятность выживания фотона в процессах фотоэффекта $\Lambda_\Phi = \Sigma_s / (\Sigma_s + \Sigma_g)$, интегральная вероятность поглощения фотона $P = 1 - \Lambda_\Phi \Lambda_k)$, начальная интенсивность падающего потока гамма-квантов излучения равна 1. Величина поглощенной энергии в единицах начального потока определяется как

$$E_p = g \frac{[1 - A_\infty(y_0, z_0, E_0)]\{1 - \exp[-K(y_0, z_0, E_0)\mu d]\}}{1 + A_\infty(y_0, z_0, E_0)\exp[-K(y_0, z_0, E_0)\mu d]} \qquad (1)$$

Пример расчета по формуле (1) с учетом формул (2-12) поглощения R - квантов в образцах различных геометрических размеров (цирконий) проиллюстрированы на рис. 1.

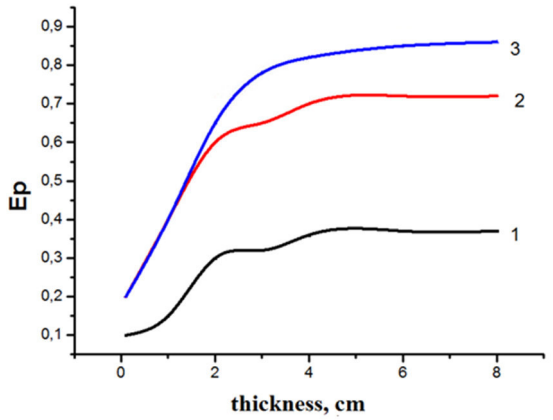


Рис. 1. Зависимость поглощенной энергии (в долях от падающего потока) от толщины образца. 1- сечение размерами 2.8x2.8 см; 2 – 0.28x0.28 м; 3 – 0.33x0.33

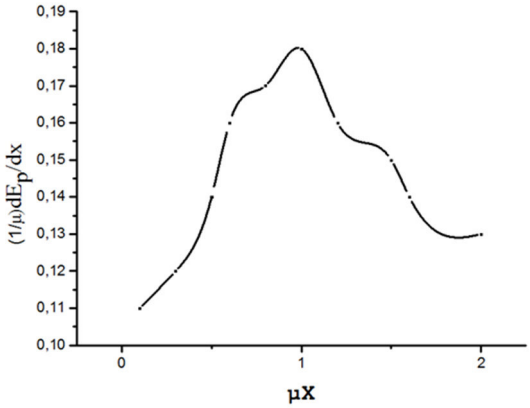


Рис. 2. Распределение поглощенной энергии γ – квантов по толщине образца циркония (теоретический расчет, энергия гамма-квантов равна 0.08 МэВ)

На рис. 1 максимальное поглощение R - квантов данной энергии наблюдается для образцов сечением 0,556x0,556 м и более. Но, например, для мишени сечением 2,8x2,8 см относительное поглощение составляет ~ 40%. Изменение доли поглощенных R -квантов от толщины *x* мишени является очевидным и растет с увеличением *x* для образцов любого поперечного сечения

На рис. 2 приведено распределение относительной энергии поглощенных квантов по толщине образца с размерами y_0=z_0=20 см; *d=3* см (энергия R - квантов E_0=0,08 МэВ. В этом случае при выборе коэффициента ослабления μ(*E*) [1, 3, 4] учитывалось, что для R -квантов, рассеянных в направлении, перпендикулярном падающему потоку, происходит изменение энергии в результате комптоновского рассеяния. Анализ расчетов показывает также, что поглощение энергии происходит неравномерно по площади образца из-за интенсивного ухода γ -квантов через боковые поверхности образца. Можно предположить, что накопление дефектов будет происходить неравномерно соответственно данному эффекту. Поэтому при анализе образца различными методами необходимо учитывать данную особенность, перемещая датчик по поверхности облученного образца. Отмечаем, что эту особенность

поглощения энергии в условиях многократного рассеяния R-квантов следует принимать во внимание при облучении образцов небольших размеров, которые используются в предварительных экспериментах.

Заключение и выводы. Исследования влияния геометрических размеров образцов гидридообразующих сплавов циркония Zr-1Ni-H при их облучении рентгеновскими квантами на количество поглощенной энергии доказаны теоретически и экспериментально. Показано, что чем меньше поперечные размеры образца или изделия, тем меньше поглощается энергии при постоянной толщине образца. Например, образец циркония сечением 2.8x2.8 см поглощает 30-35 % энергии от падающего на него потока R-квантов. Расчеты показывают следующее. С увеличением поперечного сечения образца до 28 см доля поглощенной энергии увеличивается более чем в 2 раза. При этом толщина изделия образца остается идентичной. Эффект объяснен многократным рассеянием рентгеновских квантов. Он приводит к неравномерному распределению дефектов, способных аккумулировать водород и должен учитываться при разработке методов анализа. Наличие краевых эффекты экспериментально подтверждено измерением термоэдс образцов сплавов циркония до насыщения водородом и облучения R-квантами после облучения. При измерениях краевых эффектов учтен фактор неоднородного наводороживания образцов по методу Сивертса. Величина термоэдс изменяется более чем в 1.6 раза и зависит от количества введенного водорода в мишень, размеров мишени и координаты положения зонда на теле мишени.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Горячев Б. В., Ларионов В. В., Могильницкий С. Б., Савельев Б. А. О методе расчета прохождения гамма-излучения через плоские барьеры // Атомная энергия. – 1987. – Т. 62. – № 5. – С.356–357.
2. Chernov I.P., Ivanova S.V., Krening M.Kh, Koval' N.N., Larionov V.V., Lider A.M., Pushilina N.S., Stepanova E.N., Stepanova O.M., Cherdantsev Yu.P.(2012). Properties and Structural State of the Surface Layer in a Zirconium Alloy Modified by a Pulsed Electron Beam and Saturated by Hydrogen. Technical Physics, 57, no 3. pp. 392–398.
3. Ларионов В.В., Никитенков Н.Н., Тюрин Ю.И. Миграция водорода в металлах в условиях наводороживания и облучения электронами // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2014. – Т. 57.– № 11-2.– С. 129–133.
4. Ларионов В.В., Лидер А.М. Влияние водорода на проводимость титана в условиях облучения электронами // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2014. – Т.57. – № 11-2. – С. 124–128.

МЕТОДИКА ИЗМЕРЕНИЯ ВЫСОКИХ КОНЦЕНТРАЦИЙ ВОДОРОДА НА АНАЛИЗАТОРЕ ВОДОРОДА RHEN602 ФИРМЫ LECO

М.Н. Бабихина

Научный руководитель: ассистент В.Н. Кудияров

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: m.babihina@mail.ru

THE METHOD OF MEASUREMENT HIGH HYDROGEN CONCENTRATION BY USING HYDROGEN ANALYZER RHEN602 BY LECO

M.N. Babikhina

Scientific Supervisor: assistant V.N. Kudiiarov

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

E-mail: m.babihina@mail.ru

Abstract. *The method of high hydrogen concentration measurement has been developed for hydrogen analyzer RHEN602 by LECO. The motivation for this work is connected with necessity to determine hydrogen concentration in hydrogen-storage materials. The calibration curve for high hydrogen concentrations has been plotted. The standard deviation is 10% for developed method.*

Введение. Разработка перспективных материалов-накопителей водорода (МНВ) с оптимальным элементным и фазовым составом является одной из важных задач для развития водородной энергетики [1]. Измерение концентрации водорода в МНВ является важным этапом разработки и тестирования материалов. Для измерения концентрации водорода в металлах используют метод экстракции водорода в среде инертного газа, данный метод заложен в принцип работы анализатора водорода серии RHEN фирмы LECO [2]. Анализаторы фирмы LECO калибруются по эталонным образцам с концентрацией водорода от 6 до 60 ppm, обладают чувствительностью 0,02 ppm и погрешность определения небольших (до 100 ppm) концентраций водорода не превышает 10%. Однако, при измерении высоких концентраций водорода погрешность измерения может быть существенно больше, так как при калибровке используются эталонные образцы с низкой концентрацией. Кроме того, измерение высоких концентраций водорода в ряде случаев может не получиться при превышении верхнего порога чувствительности термокондуметрической ячейки.

Принимая во внимание все вышеуказанное, актуальным является разработка методики измерения высоких концентраций водорода в материалах-накопителях водорода методом экстракции в среде инертного газа.

Материалы и методы исследования. В качестве материала для исследования использовался циркониевый сплав Э110, насыщенный до максимальной концентрации 2 масс.% при 550 °С и давлении 2 атм. Насыщение исследуемого материала производилось с помощью автоматизированного комплекса Gas Reaction Controller LPB фирмы Advanced Material Corporation. Определение концентрации

производилось тремя методами; гравиметрическим, волюмометрическим и экстракцией в среде инертного газа.

Результаты и их обсуждение. Одним из этапов разработки методики является способ нагрева печи. В анализаторе существует метод линейного и ступенчатого нагрева. Так как основной целью работы является измерение высоких концентраций водорода в материалах-накопителях, то на датчик потока масс необходимо подавать постепенно выделяющийся из материала водород. Данный процесс осуществим при ступенчатом нагреве печи. Путем экспериментального анализа было подобрано начальное значение температуры, значение которой составляет 200 °C, что соответствует 170 А.

Параметры времени нагрева и выдержки определялись также путем экспериментального анализа, значение которых составили 15 и 20 секунд соответственно. На следующем этапе необходимо подобрать шаг нагрева печи. После проведения анализа кривой (рисунок 1), полученной методом термодесорбционной спектроскопии титанового сплава, было установлено, что оптимальным шагом является шаг 100 °C, соответствующий 60 А.

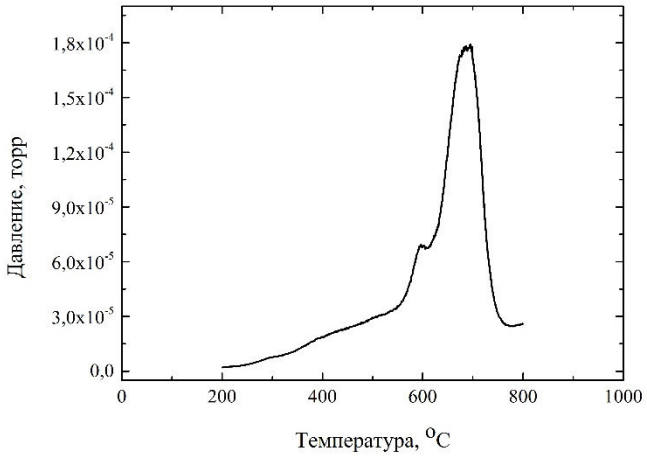


Рис. 1. Кривая ТДС циркониевого сплава

Первый пик десорбции водорода из циркониевого сплава наблюдается при температуре 600 °C. Данная температура соответствует фазовой границе между областями существования фаз δ и β+δ. Таким образом, на данном этапе ТДС происходит диссоциация гидридов, находящихся в материале.

Ещё один высокотемпературный пик, лежащий в диапазоне температур от 690 °C до 720 °C, соответствует переходу от α-фазы к β-фазе.

Для сравнения были взяты дополнительные значения шага нагрева печи 200 °C и 50 °C, которые эквивалентны 120 А и 30 А соответственно.

После подбора параметров времени для каждого этапа необходимо определить максимально возможную массу пробы, которую можно использовать для измерений. В таблице 1 представлены результаты измерения проб с разной массой для каждого этапа.

Таблица 1

Определение массы измеряемой пробы для каждого этапа

Размер шага	Масса 0,01±0,002 г	Масса 0,02±0,002 г	Масса 0,03±0,002 г	Масса 0,04±0,002 г
120 А	+	+	–	–
60 А	+	+	+	–
30 А	+	+	+	+

При шаге нагрева печи 200 °C ± 50 °C (120 А) видно, что масса измеряемой пробы составляет 0,02 грамма. В данном режиме не стоит проводить измерение. При шаге нагрева печи 100 °C ± 50 °C (60 А) видно, что максимальная масса пробы, которая может использоваться для измерения содержания водорода составляет 0,03 грамма, также время анализа оптимально подходит для проведения измерений. При шаге нагрева печи 50 °C ± 50 °C (30 А) максимальная масса пробы составляет 0,04 грамма. Однако,

учитывая, что максимальное время анализа не может превышать 600 с, данные параметры не могут быть выбраны как основные для проведения измерений, так как процесс определения содержания водорода в материале не должен быть продолжительным по времени.

Для установления точности разработанной методики необходимо иметь в наличии материал с заранее известной точной концентрацией, так как методика разрабатывалась для измерения высоких концентраций, то и материал должен быть с известной высокой концентрацией водорода. Для подобного рода концентраций в качестве стороннего метода для определения содержания водорода может выступать гравиметрический способ.

Калибровка была проведена по имеющимся стандартным образцам с концентрацией водорода 21,9±2,7 ppm и по полученному порошку циркониевого сплава с концентрацией водорода 20000±1000 ppm. После калибровки была проведена серия измерений и полученные концентрации легли в доверительный интервал 10 %.

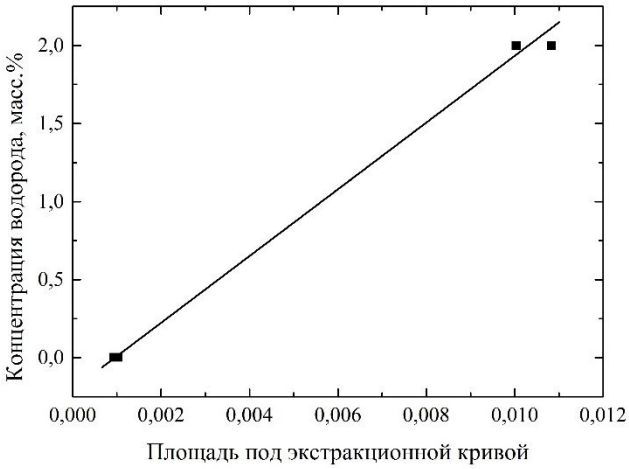


Рис.2. Калибровочная прямая полученной методики

В результате проведения калибровки была получена калибровочная прямая, представленная на рисунке 2, описанная линейным уравнением $y = 2{,}1293x + 0{,}00150203$.

Заключение. В настоящей работе была разработана методика измерения высоких концентраций водорода в пробах с большой массой на анализаторе водорода RHEN602 фирмы LECO. В ходе работы было установлено:

1. Оптимальный способ увеличение температуры печи при анализе методом ступенчатого нагрева;
2. Подобрана минимальная температура начала анализа;
3. Подобраны оптимальные ступени и шаги нагрева печи для анализа;
4. Установлена максимально возможная используемая масса пробы, значение которой составляет 0,03±0,002 г.;
5. Точность разработанной методики составляет ≈10%.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Borzenko V., Eronin A. The use of air as heating agent in hydrogen metal hydride storage coupled with PEM fuel cell //International Journal of Hydrogen Energy. – 2016. – Т. 41. – №. 48. – С. 23120-23124.
2. Определение общего и поверхностного водорода методом плавления в атмосфере инертного газа: [Электронный ресурс] // LECO Corporation – представительство в России. 2012. – Режим доступа: http://ru.leco-europe.com/product/rhen602/.

ВЛИЯНИЕ ЛАЗЕРНОЙ ОБРАБОТКИ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА НИТРОЦЕМЕНТОВАННОЙ СТАЛИ

Ю.С. Бахрачева

Научный руководитель: профессор, д. ф.-м. н. И.В. Запороцкова

Волгоградский государственный университет

Россия, г. Волгоград, 400062, просп. Университетский, 100

E-mail: bakhracheva@yandex.ru

INFLUENCE OF LASER PROCESSING ON STRUCTURE AND PROPERTIES OF THE NITROCEMENTED STEEL

Yu.S. Bakhracheva

Research supervisor: professor, Doctor of Physical and Mathematical Sciences I.V. Zaporotskova

Volgograd state university, Russia, Volgograd, Universitetsky Avenue, 100, 400062

E-mail: bakhracheva@yandex.ru

***Abstract**. In work influence of laser heat treatment of the nitrocemented layers on phase composition, structure and hardness of blankets of low-carbonaceous steel is investigated. It is shown that the combined heat treatment staly allows to provide good operational properties of blankets metal products.*

Введение. Вопросам воздействия концентрированных потоков энергии на материалы уделяется сейчас повышенное внимание. Одним из направлений развития этой технологии является лазерная термическая обработка предварительно цементованной (нитроцементованной) стали, позволяющая повысить твердость, прочность и износостойкость поверхностных слоев.

Целью данной работы является изучение влияния лазерной термической обработки нитроцементованных слоев на фазовый состав, структуру и твердость поверхностных слоев малоуглеродистой стали 18ХН3МА.

Материалы исследования. Нитроцементации с последующей лазерной термической обработкой подвергались образцы из низкоуглеродистой стали 18ХН3МА (0,16-0,18%C; 3,4%Ni; 0,8%Cr; 0,52%Mo; 0,43%Mn; 0,35%Si; 0,06%Al; 0,008%S; 0,012%P; 0,015%N; 0,01%O; 0,01%H).

Результаты. В нитроцементованных слоях с высоким содержанием азота, особенно при получении слоев толщиной более 1,2 мм возможно образование скоплений карбонитридов, окислов, трооститный и бейнитный структур. Эти структурные и фазовые образования снижают твердость, ударную вязкость, пластические характеристики, поверхностную контактную усталость, износостойкость в условиях ударно-циклического нагружения и в условиях трения скольжения. Применение лазерной термической обработки нитроцементованных слоев без оплавления поверхности позволило сформировать структуру с высоким количеством остаточного аустенита (до 80 – 100%), измельченным зерном, устранить трооститные и бейнитные структуры, повысить твердость, пластичность и износостойкость диффузионного слоя.

Из представленных данных видно (рис. 1), что наиболее высокую износостойкость имеют нитроцементованные слои с высоким содержанием азота после лазерной термической оработки. Это

оусловлено особым влиянием высокого содержания азота на формировние еще до испытаний структуры с высокой прочностью, пластичностью, стабильностью и на кинетику изменений структуры и свойств диффузионных слоев в процессе испытаний на изнашивание.

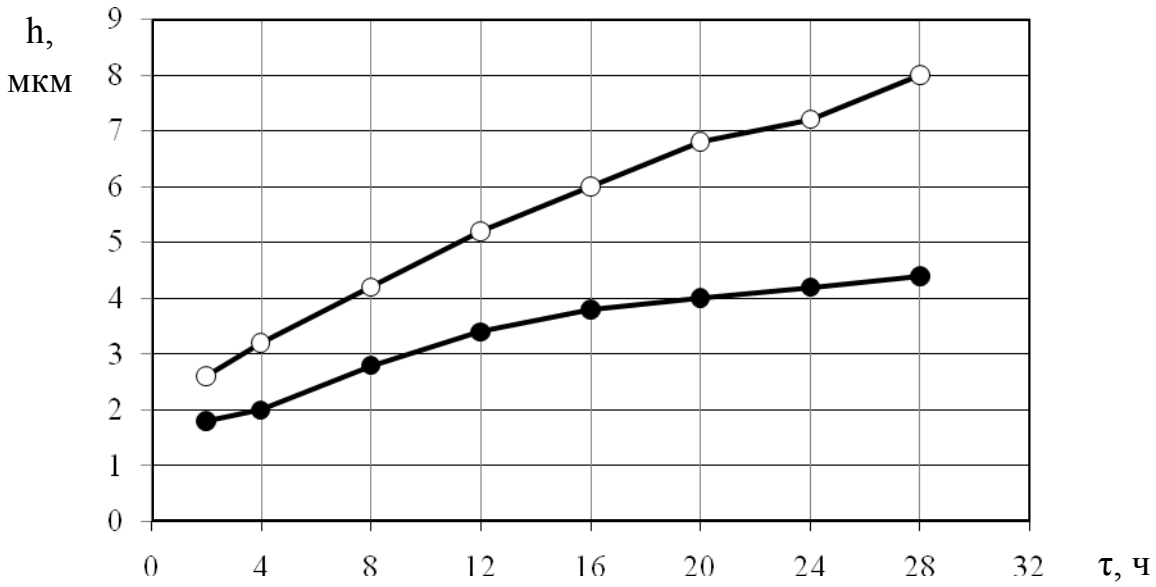


Рис. 1. Средняя глубина изношенной лунки нитроцементованных слоев
○ – до лазерной обработки; ● – после лазерной обработки

Анализ экспериментальных результатов показывает, что остаточный аустенит, возникающий в нитроцементованной стали при лазерной обработке является метастабильным, и в процессе изнашивания претерпевает превращение. Мартенсит деформации, возникающий при изнашивании в результате протекания в стали α → γ превращения обладает высокой твердостью.

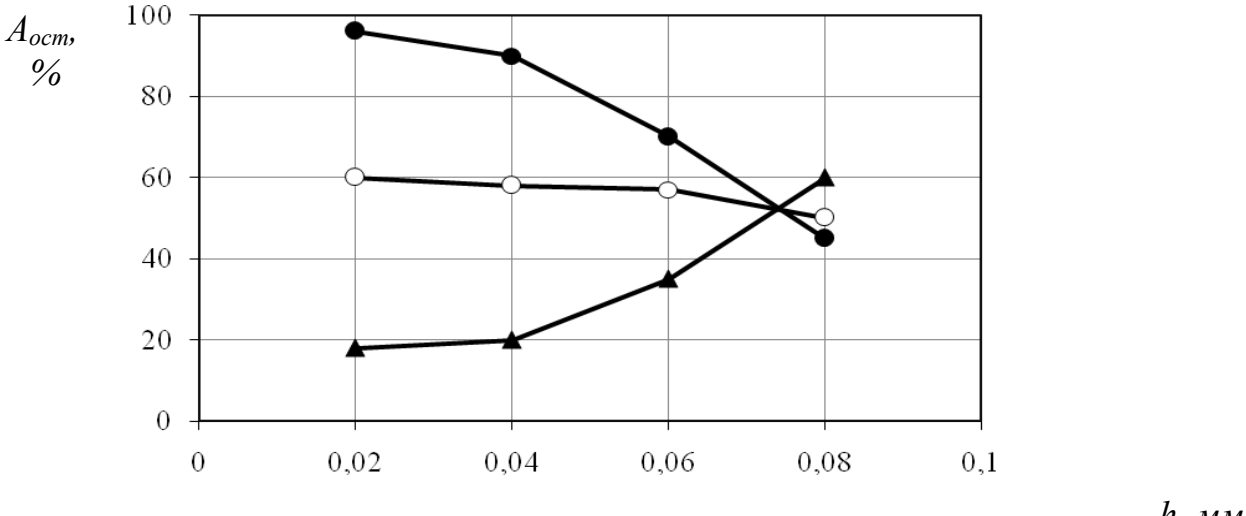


Рис. 2. Распределение остаточного аустенита по толщине нитроцементованных слоев стали 18
○ – нитроцементация; ● – нитроцементация и лазерная обработка (до испытаний); ▲ – нитроцементация и лазерная обработка (после испытаний)

В нитроцементованных слоях с содержанием азота 0,5 – 1,0 после лазерной закалки формируется структура с содержанием азотистого аустенита 80 – 100 % претерпевающем в процессе изнашивания γ →

α превращение не более 5 – 10% и обладающим большей способностью к деформационному упрочнению в процессе изнашивания (рис. 2). Например, уровень твердости на поверхности изнашивания нитроцементованной стали с содержанием азота 0,7 – 1,0% обработанной лазером достигает 1200 HV (рис. 3.).

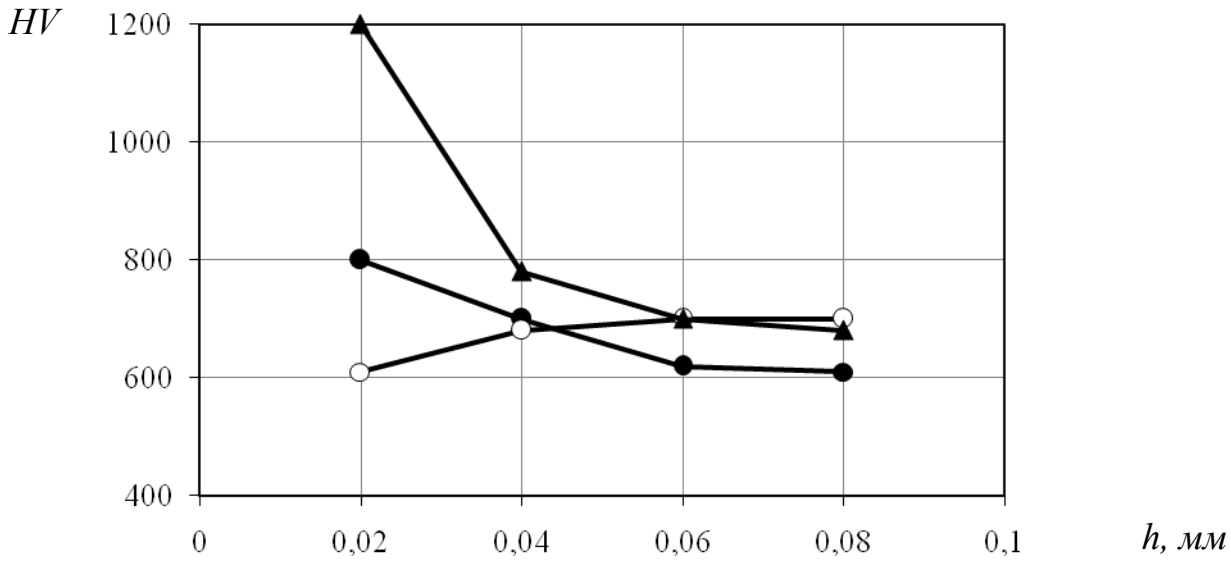


Рис. 3. Распределение твердости по толщине нитроцементованных слоев стали 18ХН3МА

○ – нитроцементация

● – нитроцементация и лазерная обработка (до испытаний)

▲ – нитроцементация и лазерная обработка (после испытаний)

Высокий уровень твердости при сохранении большого количества остаточного аустенита в нитроцементованной стали с высоким содержание азота, обработанной лазером, обеспечивает высокую износостойкость упрочненного слоя.

Заключение. Анализ проведенных исследований показывает, что комбинированная термическая обработка сталей – нитроцементация с высоким содержанием азота и лазерная закалка позволяет, наряду с получением требуемой глубинной контактной выносливости, обеспечить хорошие эксплуатационные свойства поверхностных слоев металлический изделий.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шапочкин, В. И. Нитроцементация в условиях периодического изменения состава атмосферы / В. И. Шапочкин, Л. М. Семенова, Ю. С. Бахрачева // Материаловедение. – 2010. – № 8. – С. 52–58.
2. Shapochkin V.I., Semenova L.M., Bakhracheva Yu.S., Gyulikhandanov E.L., Semenov S.V. Effect of Nitrogen Content on the Structure and Properties of Nitrocarburized Steel. *Metal Science and Heat Treatment*, 2011, vol. 52, no. 9-10, pp. 413-419.

НИЗКОТЕМПЕРАТУРНАЯ ТЕПЛОЁМКОСТЬ ГРАФЕНА

А.А. Белослудцева[1], Л.Д. Баркалов[1]

Научные руководители: к. ф.-м. н. Н.Г. Бобенко[2], к. ф.-м. н. А.Н. Пономарёв[2]

[1]Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 40, 634050

[2]Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: Ann.Bell0301@gmail.com

LOW-TEMPERATURE HEAT CAPACITY OF GRAPHENE

A.A. Belosludtseva[1], L.D. Barkalov[1]

Scientific Supervisor: PhD N.G. Bobenko[2], PhD A.N. Ponomarev[2]

[1]Tomsk State University of Control System and Radioelectronics, Russia, Tomsk, Lenin str., 40, 634050

[2]Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: Ann.Bell0301@gmail.com

Abstract. *The expression for the electronic heat capacity of the graphene with impurities and areas of short-range order was obtained in this study. It is shown that the value of heat capacity is determined linear contributions from the ideal structure and impurities. The quadratic contribution from scattering at the short-range structures determined by the size of an elementary translational element graphene. It can significantly change the temperature behavior of the heat capacity of the ordering and stratification cases. A comparison the calculated values of the electronic contribution and theoretical data on the phonon heat capacity allow us to say that the electronic heat capacity of non-ideal graphene can be decisive in the temperature range up to ~ 100K.*

Введение. Современные технические возможности пока не позволяют экспериментально исследовать теплоемкость графена. На настоящий момент существуют единичные теоретические работы по теплоемкости преимущественно идеального графена [1-3]. Однако, ряд исследователей [4] сходится во мнении, что дефекты в решетке, примеси, различные изотопы, механические "морщины / складки" или контакты с другими материалами способны сильно влиять на температурное поведение теплоемкости. Авторы [1-3] отмечают, что именно примеси, кулоновское взаимодействие, площадь графенового листа и, возможно, фононное взаимодействие определяют низкотемпературное поведение теплоемкости. В рамках настоящего исследования была рассчитана электронная теплоемкость графена с примесями и областями ближнего порядка.

Материалы и методы исследования. Понятие параметра ближнего порядка можно использовать для качественного и количественного описания дефектности структуры графена. Для бездефектной структуры сумма параметров ближнего порядка считается равной 0. В случае расположения топологических дефектов в первой координационной сфере и атомов другого сорта во второй и последующей координационных сферах сумма параметров порядка положительна, а когда в первой координационной сфере имеются атомы, отличные от углерода, эта сумма отрицательна. Значение параметра порядка тем больше отличается от 0, чем больше концентрация дефектов в структуре графена.

Расчет теплоемкости для металлизированного эпитаксиального графена с примесями и структурными областями типа ближнего порядка проводился методом температурных функций Грина с использованием полученных ранее в [5] выражений для времени релаксации. Выражение для электронной теплоемкости графена, полученное нами аналогично тому, как было сделано в [6], приведено ниже:

$$C = \frac{2}{3}\frac{\pi^2 k^2}{\hbar \upsilon_F^2}\left\{ v_0 T + \frac{1}{\tau_{пр}}\left(5\left(1 - \frac{1-c}{N}\alpha\right)T + 2\frac{1-c}{N}\alpha\beta T^2 \right)\right\}, \quad (1)$$

здесь v_F - скорость электронов на уровне Ферми, $v_0 = \frac{m}{2\pi\hbar^2}$ - плотность электронных состояний на уровне Ферми, $\tau_{пр}^{-1} = \frac{2\pi}{\hbar} c U_0^2 v_0$ - обратное время релаксации электронов на примеси, c – концентрация примеси, α - параметр ближнего порядка, N – количество атомов в ближнеупорядоченной области, $\beta = \pi\frac{R^2 m}{\hbar^2}k$. В (1) опущено слагаемое $T\tau_{пр}^{-1}\left(\frac{1-c}{N}\alpha - 1\right)\ln\left(1 + \frac{1-c}{N}\alpha(\beta T - 1)\right)$ в фигурных скобках. В области рассматриваемых температур (до ~60К) оно не влияет на температурное поведение С. При температуре ~100К и выше данный вклад может оказаться существенным.

Результаты. Теплоемкость (1) зависит от температуры, параметра ближнего порядка, размеров элементарной ячейки графена, концентрации инородных атомов. Основные линейные по температуре вклады определяются ПЭС бездефектного графена (первое слагаемое) и рассеянием электронов на примеси (второе слагаемое при α=0). Линейный вклад от рассеяния электронов на областях ближнего порядка незначительно увеличивает теплоёмкость в случае упорядочения и уменьшает при расслоении (~5%). Квадратичный - определяется величиной β, зависящей от размера элементарной ячейки графена. Для элементарной ячейки с линейным размером, и квадратичный вклад практически отсутствует. Для графена, сформированного из суперячеек с $R \approx 2.5nm$, и данное слагаемое вносит значительный вклад в теплоемкость. В случае упорядочения квадратичный вклад уменьшает, а в случае расслоения увеличивает электронную теплоемкость.

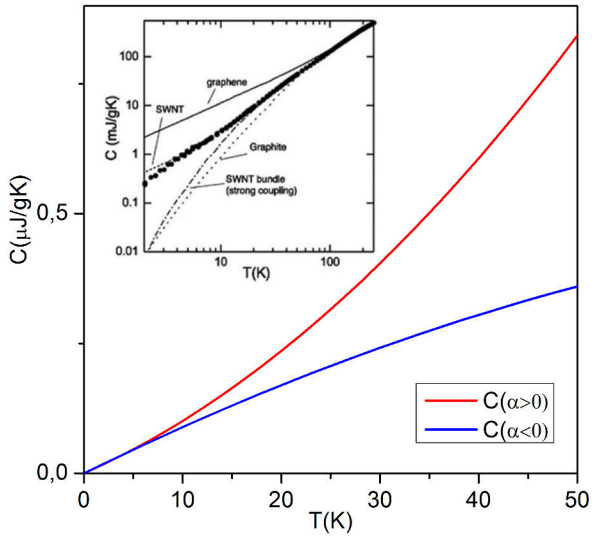


Рис.1. Температурные зависимости электронной теплоемкости для случаев упорядочения (a=*-0,17*) *и расслоения* (a=*0,61*). *На вставке представлена теплоемкость углеродных наноматериалов [7].*

Если параметр ближнего порядка α в (1) зависит от температуры так, что меняет знак, т.е. происходит переход расслоение-упорядочение, то на $C(T)$ будет наблюдаться скачек при температуре перехода.

На Рис.1 приведены температурные зависимости электронной теплоемкости для случаев упорядочения ($\alpha<0$) и расслоения ($\alpha>0$) Полученные зависимости подобны и близки по величине с рассчитанной фононной теплоемкостью и экспериментальными данными для одностенных углеродных нанотрубок (вставка из Рис.1). Т.е. электронная теплоемкость неидеального графена может быть определяющей в области температур до ~100K. Тем более что вопрос о существовании фононов в сильно неоднородных структурах требует отдельного обсуждения.

Заключение. В рамках настоящего исследования было получено выражение для электронной теплоемкости графена с примесями и локальными областями ближнего порядка. Показано, что величину теплоемкости определяют линейные вклады от идеальной структуры и примесный. Квадратичный вклад от рассеяния на областях ближнего порядка определяется размерами элементарного трансляционного элемента структуры графена и может также существенно изменять температурное поведение теплоемкости для случаев упорядочения и расслоения. Сравнение значений рассчитанного электронного вклада и теоретических данных о фононной теплоемкости графена позволяют говорить о том, что электронная теплоемкость неидеального графена может быть определяющей в области температур до ~100K.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Mishra, L. P., Mishra, L. K. (2015). A theoretical evoluation of specific heat of carbon nanotubes as a function of temperature. Int. J. Chem. Sci., no. 13(2), pp. 585-592.
2. Alisultanov, Z.Z., Reis, M.S. (2016). Magneto-oscillations on specific heat of graphene monolayer. Phys. Lett. A., no. 380, pp. 470–474.
3. Fong, K. Ch, Wollman, E. E., Ravi, H. (2013) Measurement of the Electronic Thermal Conductance Channels and Heat Capacity of Graphene at Low Temperature. Phys.Rev. no.3.
4. Pop, E., Varshney, V., Roy, Ajit K. (2012). Thermal properties of graphene: Fundamental and applications. Materials Research Society, no. 37, pp.1273-1281.
5. Бобенко Н.Г., Егорушкин В.Е., Мельникова Н.В., Пономарев А.Н., Баркалов Л.Д., Латышев А.М., Истомина Е.Б., Белослудцева А.А. Бобенко А.В. Ближний порядок и электронные свойства в эпитаксиальном графене // Тезисы докладов Международная конференция Перспективные материалы с иерархической структурой для новых технологий и надежных конструкций. – Томск, 2016 – С. 115-116.
6. Ponomarev, A. N., Egorushkin, V. E., Melnikova, N. V., Bobenko, N.G. (2015) On the low-temperature anomalies of specific heat in disordered carbon nanotubes. Physica E., no.66, pp. 13-17.
7. Hone, J., Batlogg, B., Benes, Z., Johnson, A.T., Fischer, J.E. (2000). Quantized phonon spectrum of singlewall carbon nanotubes. Science, no.289, pp.1730-1733.

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕОДНОРОДНОЙ ДЕФОРМАЦИИ ЛЕНТОЧНЫХ АМОРФНЫХ СПЛАВОВ В УСЛОВИЯХ НАГРЕВА С ПОСТОЯННОЙ СКОРОСТЬЮ

А.Д. Березнер

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

Тамбовский государственный университет им. Г.Р. Державина,

Россия, Тамбов, Интернациональная 33, 392000

E-mail: qwert1009@mail.ru

INVESTIGATION OF INHOMOGENEOUS DEFORMATION IN RIBBON AMORPHOUS ALLOYS UNDER HEATING WITH CONSTANT RATE

A.D. Berezner

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

Tambov State University n.a. G.R. Derzhavin,

Russia, Tambov, Internatsiolalnaya str. 33, 392000

E-mail: qwert1009@mail.ru

Abstract. *Investigations of Co-based amorphous alloys failure strain at creep tests within a temperature range being from 300 to 1023 K have been performed. Creep curves of all alloys types have shown up creep strain jumps and damped oscillations. It has been shown that destruction of ribbon specimens is accompanied by tightening and corrugating.*

Введение. Аморфные металлические сплавы обладают уникальными магнитными, механическими и антикоррозионными свойствами, что способствует применению данного материала в промышленности. Одним из перспективных направлений материаловедения и инженерии является исследование ползучести аморфных металлических сплавов в условиях внешних воздействий.

Известно [1] что для ползучести массивных сплавов кристаллического алюминия при постоянной температуре характерно проявление скачкообразного увеличения деформации. Данное свойство представляет интерес в области нелинейной пластичности материалов. Аналогичный эффект может проявляться при деформации ленточных аморфных сплавов в переменном температурном поле. В связи с этим, целью данной работы является исследование скачкообразной деформации в ленточных металлических стеклах на основе кобальта в условиях нагрева с постоянной скоростью.

Материалы и методика исследований. В экспериментах использовали аморфные металлические сплавы на основе кобальта, элементный состав которых представлен в табл. 1.

Таблица 1

Элементный состав сплавов

Сплав (АМАГ)	Co%	Fe%	Ni%	Si%	Mn%	B%	Cr%	Cu%	Nb%
170	70.42	4.7	10.46	9	2.1	2	1.3	-	-

179	78.1	3.31	8.19	5.48	1.61	2	1.31	-	-
180	78.65	4.03	4.73	7.22	1.88	2	1.49	-	-
183	82.69	2.21	-	7.77	4.19	2	1.14	-	-
186	85.41	2.27	-	5.15	4.07	2	1.1	-	-

Объектами исследования служили ленточные образцы размером 50×3,5×0,02 мм. Предварительно нагруженные образцы (σ = 12,8 МПа) нагревали в печи при температурах от 300 до 1023 К. Скорость нагрева поддерживали постоянной ≈ 1 К/с. Испытания проводились в воздушной среде. Температуру образца фиксировали лазерным пирометром Testo-845. Удлинение образцов измеряли лазерным триангуляционным датчиком, рельеф поверхности лент фиксировали профилометром Wyko NT 9080 (длина волны излучения λ = 670 нм). Для выявления аморфизации структуры выполняли нейтронографические исследования на дифрактометре ДН-2 (ОИЯИ, Дубна). Тепловые эффекты, связанные с кристаллизацией при нагреве, регистрировались методами термического анализа.

Результаты и их обсуждение. Экспериментально установлено, что при нагреве образцов с приложением постоянной механической нагрузки кривая деформации является гладкой или сопровождается скачками (Рис.1).

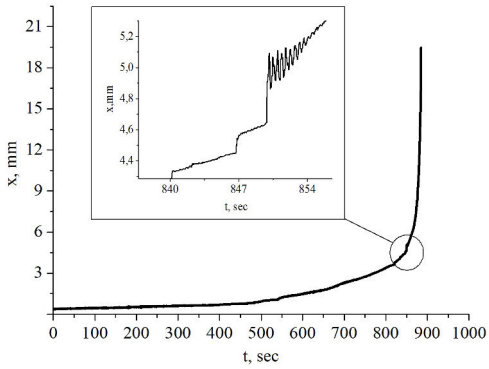


Рис. 1. Температурно-временная зависимость удлинения образца АМАГ-186. На вставках представлен участок скачкообразного увеличения деформации.

Величина необратимых скачков деформации в среднем составляет не более 1 % от общего удлинения образца и превосходит величину погрешности лазерного триангуляционного датчика на три порядка. Общая деформация ленты составляет 60% от первоначальной длины образца. Отмечено, что скачки деформации сопровождаются затухающими колебаниями на кривых ползучести. Появление скачков деформации, может быть связано с кристаллизацией, а также с перемещением полос сдвига в структуре образца. Методами дифференциальной сканирующей калориметрии установлена температура кристаллизации аморфных сплавов и было показано, что деформационная неоднородность возникает преимущественно вблизи области завершенной кристаллизации сплавов. Нейтроно- и рентгенографические исследования лент показали, что при температурах до 600 К образцы имеют аморфную структуру и с ростом температуры свыше 650 К наблюдаются дифракционные максимумы, соответствующие процессам кристаллизации. Разрушение образцов носит вязкий характер,

сопровождается значительным удлинением и продольным гофрированием лент (рис. 2). Толщина образца в зоне утяжки составляет ~ 1мкм, а ширина ~ 1,6 мм.

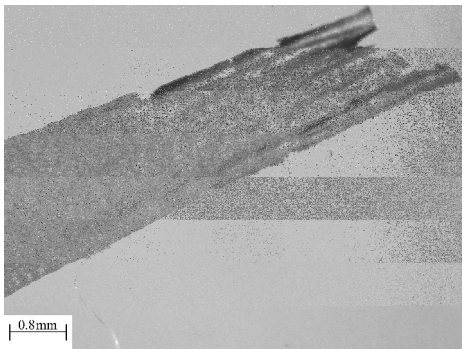


Рис. 2. Внешний вид образцов АМАГ-186 после разрушения

Установлено, что амплитуда рельефа между впадинами и возвышенностями при гофрировании достигает 20–25 мкм. Образование складок, по-видимому, связано с явлением неустойчивости при деформации тонких лент. При надрезе лент в поперечном направлении на величину 0,9 мм, с их последующим испытанием на ползучесть, скачки возникают в интервале температуры кристаллизации, что может свидетельствовать в пользу связи неоднородной деформации с процессом кристаллизации.

Заключение. Неоднородно растущие кристаллы в процессе ползучести могут выступать в роли концентраторов распределенного механического напряжения, вызывая тем самым ускоренное развитие полос сдвига. Образовавшаяся в материале неустойчивость может привести к появлению скачков деформации на кривых ползучести, с последующим гофрированием образцов при их разрушении. Скачок деформации сопровождается, как правило, затухающими продольными колебаниями системы груз-образец.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 15-01-04553-а)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Shibkov A.A., Gasanov M.F., Zheltov M.A., Zolotov A.E., Ivolgin V.I. Intermittent plasticity associated with the spatio-temporal dynamics of deformation bands during creep tests in an AlMg polycrystal. International Journal of Plasticity 2016;86;37-55.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ КОЛЛИМИРОВАННОГО НЕЙТРОННОГО ПУЧКА С РАЗЛИЧНЫМИ ФАНТОМАМИ ГОЛОВНОГО МОЗГА

А.С. Бусыгин, М.Н. Аникин

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

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: asbu26@gmail.com

INTERACTION OF THE COLLIMATED NEUTRON BEAM WITH VARIOUS PHANTOMS OF THE BRAIN

A.S. Busygin, M.N. Anikin

Scientific Supervisor: PhD, A.G. Naymushin

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

E-mail: asbu26@gmail.com

Abstract. *Results of modelling of interaction of the collimated neutron beam with various phantoms of the brain are presented in the article. Modeling was carried out in the MCU-PTR program. Three homogeneous dosimetry phantoms of different structure have been simulated as biological tissues. Epithermal neutron flux density is* 10^9 $cm^{-2} \cdot s^{-1}$.

Введение. В последние десятилетия число онкологических заболеваний во всем мире ежегодно увеличивается. Смертность от злокачественных новообразований занимает одно из первых мест среди причин преждевременного ухода из жизни людей как в экономически развитых, так и в слаборазвитых странах.

В России на учете в онкологических учреждениях состоит более 2,5 млн. больных. В течение последних 10 лет число пациентов диагнозом «рак» увеличилось на 25,5 %. Ежегодно данная патология фиксируется у ~ 450 тыс. человек при смертельности 300 тыс. Только от опухоли мозга каждый год умирают до 30 тыс. больных. По прогнозам Всемирной организации здоровья, к 2030 г. число заболевших увеличится до 21 млн и 13 млн будут умирать ежегодно [1].

В современном мире технологии с использованием радиационной терапии являются одними из наиболее эффективных способов лечения злокачественных опухолей. Но основным недостатком существующей радиационной терапии является отсутствие достаточной избирательности воздействия излучения на злокачественные очаги, т.е. при облучении воздействию подвергаются здоровые ткани, особенно в тех случаях, когда опухоль имеет сложную или множественную форму. Альтернативой для этой категории больных может быть нейтрон-захватная терапия (НЗТ).

В клинической онкологии практически единственным рабочим химическим инструментом для нейтрон-захватной терапии пока остается соединения, меченные изотопом ^{10}B. Для того чтобы вклад реакции нейтронного захвата ^{10}B был определяющим, а время облучения пациента минимальным, концентрация бора в опухоли должна быть порядка 10^9 атомов бора на каждую клетку. Плотность потока тепловых (при облучении поверхностных очагов) или термализованных в живой ткани эпитепловых

нейтронов (для глубоко расположенных раковых образований) ≥ 10^9 $см^{-2}·с^{-1}$. Плотность $5·10^8$ $см^{-2}·с^{-1}$ также приемлема, но приводит к увеличению времени облучения. Источник нейтронов должен генерировать за сеанс терапии флюенс нейтронов порядка 10^{12}-10^{13} $см^{-2}$. Лечение предполагается одноразовым, длительностью не более часа. В этих условиях 75-85 % дозы будут обусловлены бор-нейтронозахватной реакцией [2].

НЗТ является одним из перспективных направлений лечения внутричерепных и иных опухолей. На базе исследовательского ядерного реактора ИРТ-Т разрабатывается экспериментальная установка НЗТ онкологических заболеваний.

Цель настоящей исследовательской работы: моделирование процесса распределения коллимированного пучка нейтронного излучения в дозиметрическом фантоме.

Материалы и методы исследования. В настоящей работе в программном средстве MCU-PTR была разработана расчетная модель, которая состояла из следующих компонентов (Рисунок 1): дозиметрический фантом; источник нейтронов; окруженный поглотителем направляющий канал, где располагается источник; зона, где, непосредственно, располагается дозиметрический фантом. В программе MCU-PTR моделирование осуществляется по методу Монте-Карло [3]. Для регистрации распределения пучка нейтронного излучения по глубине биологической ткани дозиметрический фантом был разделён на 36 зон с шириной 0,5 см (Рисунок 2).

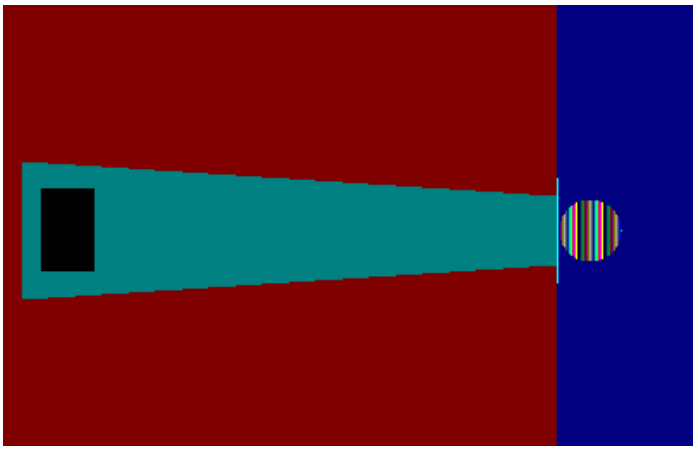


Рис. 1. Расчетная модель

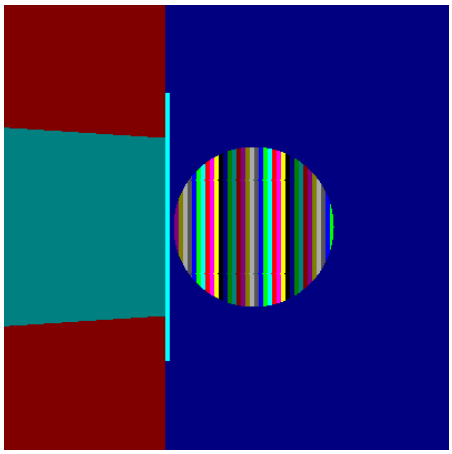


Рис. 2. Дозиметрический фантом

В настоящей работе моделировалась плотность потока равная 10^9 $см^{-2}·с^{-1}$ эпитеповых нейтронов с энергией от 1 кэВ до 30 кэВ, а также тепловых и быстрых нейтронов с наиболее вероятными и средними энергиями. Гомогенные дозиметрические фантомы моделировался с 3 материальными составами: Water – водный фантом, Brain – основные элементы человеческого мозга, ATOM – состав дозиметрического фантома «ATOM» (Таблица 1). Для определения влияния других элементов в составе биологической ткани на распределение нейтронного пучка были выбраны 2 модели фантома, в состав которых помимо воды входят другие вещества.

Результат расчетов. В результате расчетов были получены распределения пучка нейтронного излучения в дозиметрических фантомах для следующих энергетических групп нейтронов: 0–0,5 эВ – тепловые, 0,5 эВ – 10 кэВ – эпитепловые, выше 10 кэВ – быстрые (Рисунок 3).

Таблица 1

Состав моделей дозиметрического фантома

	Water	Brain	ATOM
Плотность, г/см^3	1,00	1,04	1,07
Водород, %	11,2	10,7	8,16
Кислород, %	88,8	71,2	26,49
Углерод, %	–	14,5	53,6
Азот, %	–	2,2	1,53
Хлор, %	–	–	0,19
Магний, %	–	–	9,98

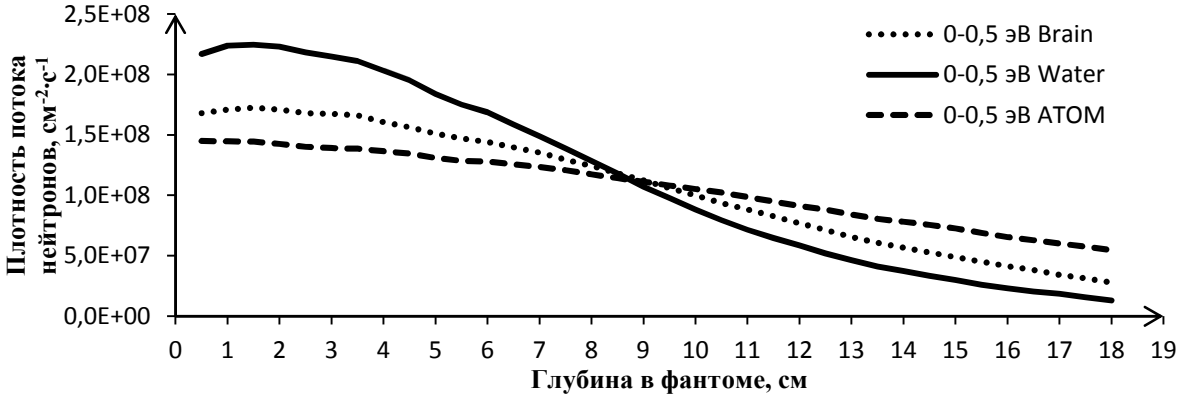


Рис. 3. Распределение пучка нейтронного излучения с энергией 0–0,5 эВ

В водяном фантоме значения плотности потока нейтронов может быть завышенным по сравнению с распределением потока нейтронов в настоящем мозге человека. На практике водяной фантом приемлемо использовать только для первичной оценки влияния нейтронного излучения на биологическую ткань мозга. Состав фантома «Brain» наиболее приближен к составу человеческого мозга, поэтому можно считать, что распределение пучка нейтронного излучения в этом фантоме имеет наименьшую погрешность, а значит лучше подходит для настоящих исследований. В составе фантома «ATOM» входит 53,6 % углерода, из-за этого накопления тепловых и эпитепловых нейтронов не наблюдается. Фантом с данным составом приемлемо использовать для моделирования взаимодействия нейтронного излучения с другими частями тела[4].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Довбня А.Н., Купленников Э.Л., Кандыбей С.С., Красильников В.В. Нейтроны против рака // ЭЧАЯ. 2014. Т.45, вып. 5-6. С. 1750–1783.
2. IAEA, Current status of neutron capture therapy // Printed by the IAEA in Austria, 2001.
3. Alexeev N. I. et al. MCU-PTR Code for Precision Calculation of Pool and Tank Types Research Reactors //Atomic Energy. – T. 109. – C. 123-129.
4. Бусыгин А.С., Аникин М.Н., Наймушин А.Г. Взаимодействие коллимированного нейтронного пучка с биологическими тканями// Сборник тезисов и докладов VII Школы-конфернции молодых атомщиков Сибири. – Томск.: Изд. СТИ НИЯУ МИФИ, 2016. – 105 С.

МИКРО- И МАКРОПРОЧНОСТЬ КЕРАМИКИ С БИМОДАЛЬНОЙ ПОРОВОЙ СТРУКТУРОЙ

А.С. Буяков, 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

MICRO- AND MACROSTRENGTH OF CERAMICS WITH A BIMODAL PORE STRUCTURE

A.S. Buyakov, E.O. Vasilyeva, D.A. Tkachev
Scientific Supervisor: Prof., Dr. S.N. Kulkov
Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050
E-mail: alesbuyakov@gmal.com

Abstract. *This paper presents the results of macro- and microstrength studying in ceramic composite materials ZrO_2-MgO with 50% porosity. Pores had a bimodal structure with average sizes about 28 and 103 microns. It was shown that the material strength is mainly determined by grain boundaries stresses and reduce with increasing of the second type stress.*

Введение. Пористые керамики – особый класс материалов, эксплуатационные характеристики которых определяются объёмом порового пространства и геометрией пор. Они нашли широкое применение в качестве фильтрующих элементов, носителей катализаторов, термостойких изоляторов и легких структурных компонентов. Большой интерес среди таких материалов вызывает композит, на основе оксидов циркония (ZrO_2) и магния (MgO) ввиду высоких прочностных свойств и стойкости к агрессивным средам. Рядом авторов уже проводились исследования по изучению этого материала композита с однородной поровой структурой [1, 2], однако в настоящее время наблюдается недостаток знаний того, как ведут себя механические и структурные параметры материала при полимодальной пористости и в широком диапазоне концентраций компонент.

Материалы и методы. В работе исследованы пористые керамические материалы ZrO_2-MgO, полученные методом холодного одноосного прессования механических смесей исходных порошков с добавлением 50 об. % частиц сверхвысокомолекулярного полиэтилена (UHMW PE) и последующим спеканием при температуре 1600 °C и изотермической выдержкой в течение часа при 300 °C для удаления порообразователя.

Изучены тонкая кристаллическая структура материалов с помощью рентгеноструктурного анализа, морфология полированной поверхности керамик с помощью растрового электронного микроскопа и определен предел прочности материалов при сжатии.

Результаты и их обсуждение. Поровая структура материалов представлена двумя видами пор – обусловленными упаковкой частиц порошка при прессовании, и обеспеченными выгоранием порообразователя, со средним размером 28 мкм и 103 мкм соответственно.

В таблице 1 представлены зависимости среднего размера областей когерентного рассеяния (ОКР) и микроискажений кристаллической кубической модификации ZrO_2 и MgO от состава. Увеличение

концентрации MgO приводит к росту ОКР кубической фазы ZrO_2, в то время как микроискажения кристаллической структуры композита и ОКР MgO уменьшаются.

Таблица 1

Зависимости ОКР и микроискажений кристаллической решетки от состава композита

Концентрация MgO	ОКР ZrO_2	ОКР MgO	Микроискажения ZrO_2	Микроискажения MgO
0%	0.037		0.024	
25%	0.051	0.067	0.008	0.008
50%	0.053	0.053	0.009	0.004
75%	0.049	0.056	0.01	0.005
100%		0.057		0.002

Испытания по определению предела прочности керамик показали, что наибольший предел прочности соответствует MgO и равен 33 МПа. С ростом концентрации ZrO_2 предел прочности снижается до минимального значения 18 МПа.

Микронапряжения, возникающие в кристаллитах и на их границах, равны произведению модуля упругости, на величину микроискажений кристаллической решетки. На рис. 1.а показана зависимость прочности исследуемой керамики от напряжений второго рода, что говорит о высоком вкладе зёренных границ в механические свойства.

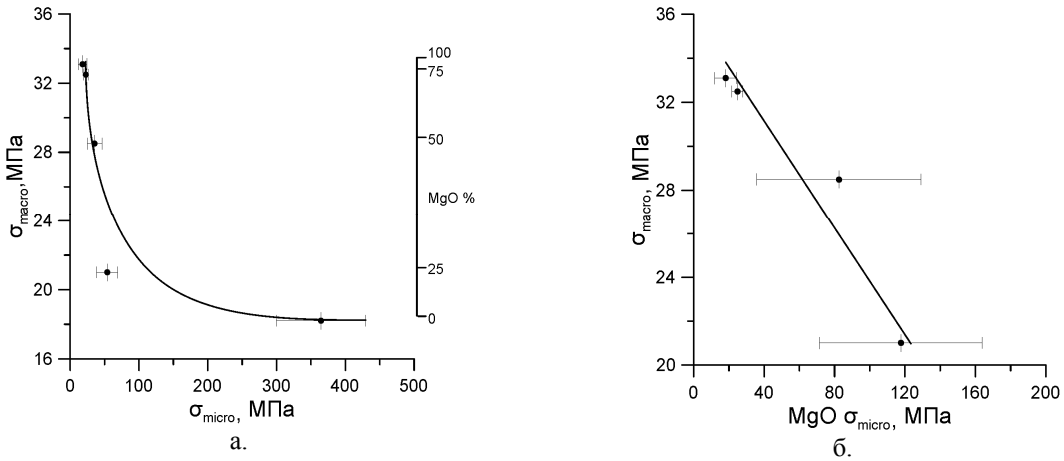


Рис. 1. Зависимость предела прочности от микронапряжений: а. композита; б. MgO.

Между микронапряжениями и пределом прочности в кристаллической решетке MgO прослеживается линейная зависимость, рис. 1.б, и с ростом напряжений второго рода прочность материала снижается, что согласуется с литературными данными по изучению подобных зависимостей в схожих кристаллических оксидных системах [3]. Зависимость прочности композита от напряжений второго рода в ZrO_2 установить не удалось.

Схожий вид имеют зависимости предела упругости, рассчитанного по правилу смеси, рис. 2, от микронапряжений в исследуемых материалах. Вид зависимости говорит о линейно-упругом разрушении: увеличение модуля упругости сопровождается уменьшением микронапряжений и увеличением предела прочности материала [4].

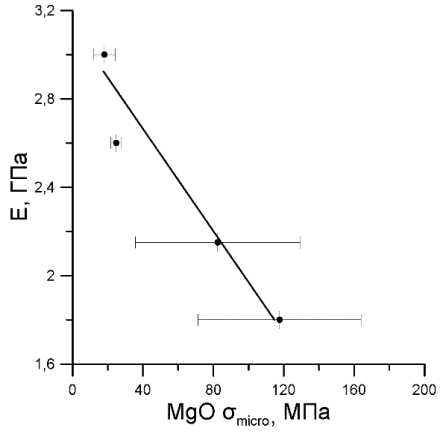


Рис. 2. Зависимость предела упругости от микронапряжений в кристаллической решетке MgO.

Выводы. В работе показано, что получение пористых керамических материалов путем введения порообразующих частиц UHMW PE позволяет достигнуть бимодальной пористости: со средним размером 28 и 103 мкм. Средний размер ОКР ZrO_2 увеличивается с ростом концентрации MgO, а микроискажения кристаллической решетки компонент композита и ОКР MgO уменьшаются. Значительный вклад в механические характеристики материалов вносят напряжения второго рода, с ростом которых прочность снижается. Зависимость предела прочности и модуля упругости от микронапряжений в MgO линейна. Зависимости этих параметров от микронапряжений в кристаллической решетке ZrO_2 не очевидны, однако суммарный вклад напряжений второго рода в компонентах композита придает описанным выше зависимостям вид логарифмической функции.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Буякова С.П. Свойства, структура, фазовый состав и закономерности формирования пористых наносистем на основе ZrO_2: автореф. дис. д-ра техн. наук. - Томск, 2008. – 11 с.
2. S. Kulkov, S. Buyakova, E. Kalatur. Porosity and mechanical properties of zirconium ceramics //AIP Conference Proceedings. – AIP, 2014. – Т. 1623. – №. 1. – С. 225-228.
3. Kumar S., Kurtz S. K., Agarwala V. K. Micro-stress distribution within polycrystalline aggregate //Acta mechanica. – 1996. – Т. 114. – №. 1. – С. 203-216.
4. Лукин Е.С., Попов Н.А., Здвижкова Н.И. Особенности получения плотной керамики, содержащей диоксид циркония // Огнеупоры и техническая керамика. – 1999. – №9. – С. 5.

ВЛИЯНИЕ ВОДОРОДА НА ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ТОНКОЙ ПЛЁНКИ ОКСИДА АЛЮМИНИЯ НА ТИТАНЕ ВТ1-0

Ван Цайлунь, Е.Д. Даулетханов, Инь Шаньшань

Научный руководитель: ассистент, к.ф.-м.н. В.С. Сыпченко

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: mujing1225@gmail.com

EFFECT OF HYDROGEN ON THE ELECTRICAL CONDUCTIVITY OF A THIN FILM OF ALUMINUM OXIDE ON THE TITANIUM ALLOY VT1-0

Wang Cailun, E.D. Dauletkhanov, Yin Shanshan

Scientific Supervisor: PhD, V.C. Sypchenko.

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

E-mail: mujing1225@gmail.com

Abstract. *One of the ways to protect titanium and its alloys from embrittlement is the application of the protection thin films on its surface. Such films (Al_2O_3) were obtained by magnetron sputtering. The changes in physical and mechanical properties in "Al_2O_3/Ti" system were studied: the lattice parameters, micro-hardness, electrical conductivity. This paper discussed the dependences of the Al_2O_3 surface resistivity from hydrogen saturation time. In particular, the increasing of Al_2O_3 surface conductivity of the film with increasing hydrogen saturation time has been found.*

Введение. Тонкоплёночные системы на основе оксида алюминия широко используются во многих высокотехнологичных отраслях промышленности благодаря своим многочисленным достоинствам: легкие и простые в обработке, низкой тепло- и электропроводностью. В литературе имеются данные, указывающие на то, что плёнка Al_2O_3 является эффективным барьером для водорода [1]. Для титана характерна хорошая пластичность, он имеет небольшой удельный вес и сохраняет характеристики в условиях резких перепадов температур. Его механическая прочность почти вдвое превышает прочность чистого железа и в шесть раз – алюминия. Сплавы титан способен активно поглощать кислород, водород и азот, что приводит к изменению его пластических характеристик.

Есть необходимость защищать поверхность металла, соприкасающегося с водородом, от водородного охрупчивания и коррозии при любом способе хранения водорода. В случае металл-гидридных накопителей стоит задача защиты от потерь водорода при самопроизвольном распаде гидридов и выходе растворенного водорода за пределы накопителя. Обе эти задачи могут быть решены с помощью нанесения тонких пленок на соответствующие поверхности: на внутреннюю поверхность контейнера с водородом при его хранении в газообразном состоянии или на внешнюю поверхность при хранении в виде металл гидрида. В литературе имеются данные, указывающие на то, что плёнка Al_2O_3 является эффективным барьером для водорода.

Целью настоящей работой является изучение закономерностей влияния водорода на электропроводность тонкой плёнки оксида алюминия на титане ВТ1-0.

Методика эксперимента. Объектом исследования являются тонкопленочные покрытия оксида алюминия, нанесенные на титан марки ВТ1-0 (Al_2O_3/Ti) методом магнетронного распыления. Выбор титана обусловлен хорошей сорбцией по водороду. Образцы титана изготавливались электроискровой резкой размерами 20×20×1 мм, с последующие механической и ионной полировкой поверхности.

На образцы-подложки Ti на установке «Яшма-2» [2] методом магнетронного распыления наносилось тонкопленочное покрытие Al_2O_3. Конструктивно установка выполнена из двух камер: шлюзовой и рабочей; шлюзовая камера предназначена для загрузки подложек без развакуумирования рабочей камеры, а в рабочей камере происходит ионная очистка и напыление покрытий. Образцы из титана помещались на подвижный столик, и камера откачивалась до предварительного вакуума $P=7\cdot10^{-5}$ торр. Ионная очистка поверхности образцов производилась при следующих параметрах: U=2,5кВ, I=0,2А. Когда мишень очищалась от ненужной оксидной пленки, в камеру добавлялся кислород и магнетронная система переводилась в рабочий режим: $P=2\cdot10^{-3}$торр, U=0,8кВ, I=10А. Таким образом, за один проход на подложку осаждалось пленка толщиной 2 нм, а общая толщина покрытия составила ~400 нм.

Выдерживание образцов титана ВТ1-0 и Al_2O_3/Ti в водородной атмосфере производилось на установке PCI «GasReactionController» методом Сивертса. Режимы водородной атмосферы были следующие: давление водорода в камере P = 2 атм, температура T = 400 °C, в течение от 1 до 4 часов.

Измерение электропроводности пленки оксида алюминия проводилось методом «накладных электродов», электроды изготовлены из медной пластинки длиной 7 мм. Вольт-амперные характеристики (ВАХ) получались в результате изменения напряжения на электродах в диапазоне 0,01 – 0,09 В и регистрации соответствующего значения тока.

Результаты и их обсуждение. На рис. 1*а* представлены результаты измерения ВАХ полученных с поверхности пленки Al_2O_3/Ti после 1, 2, 3 и 4 часов выдержки в водородной атмосфере. Откуда можно видеть, что при увеличении времени выдержки пленки Al_2O_3 в водородной атмосфере ВАХ смещаются вверх. На основании полученных ВАХ были рассчитаны поверхностные электропроводности пленок по формуле

$$\sigma = \frac{d \cdot I}{L \cdot U}$$

где σ – поверхностная электропроводность, U – значение приложенного напряжения, I – измеренная сила тока, d – расстояние между электродами, $L = 7$ *мм* – длина электрода.

Результаты поверхностной электропроводности, рассчитанные по формуле, представлены на рис. 2. Из зависимости видно, что у образцов с большим временем выдержки в водородной атмосфере, поверхностная электропроводность пленки повышается, это различие объясняется, тем что при пропускании тока через оксидную пленку ионы в пленки перераспределяются и частично разрушается p-n-переход. При этом пленка оксида алюминия превращается в электронный полупроводник, содержащий большее или меньшее (в зависимости от условий) избыточное количество ионов алюминия. Воздействие на оксидную пленку водорода, связывающего кислород, приводит оксид алюминия в электронный полупроводник [3].

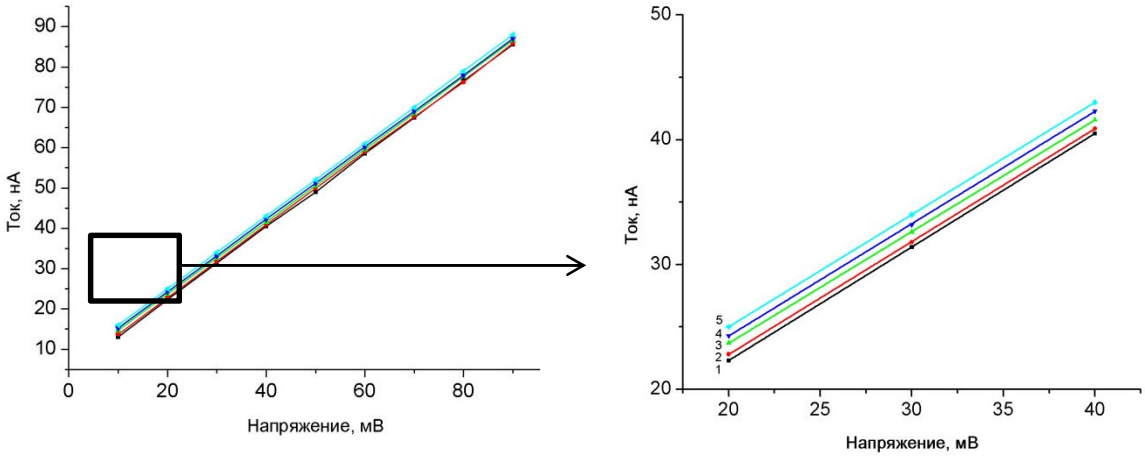


Рис.1 ВАХ системы Al_2O_3/Ti: 1 – исходная пленка и выдержанные в водородной атмосфере в течение: 2 – 1 ч, 3 – 2 ч, 4 – 3 ч, 5 – 4 ч.

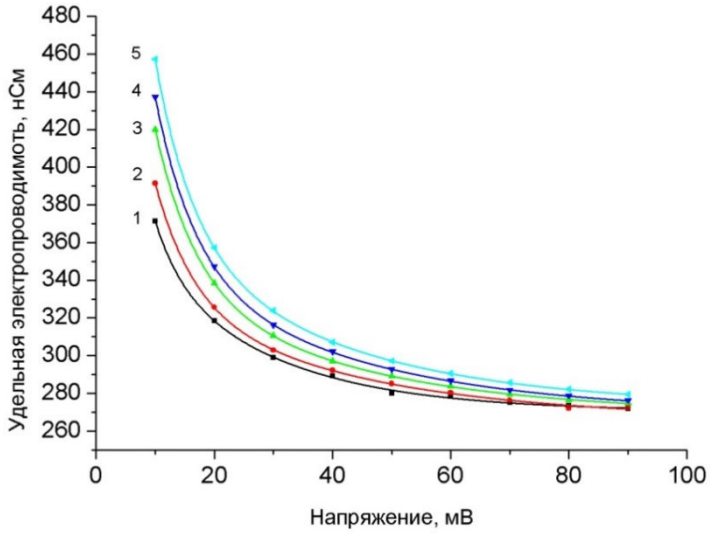


Рис.2 Зависимость поверхностной электропроводности пленки Al_2O_3 на титане выдержанной в водородной атмосфере: 1 – исходная пленка, 2 – 1 ч, 3 – 4 ч, 4 –2 ч, 5 –3 ч.

Работа выполнена при финансовой поддержке Государственного задания "Наука" в рамках научного проекта № 1524

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Junichiro Yamabe, Saburo Matsuoka, Yukitaka Murakami. International journal of hydrogen energy. (2013) 1014.
2. Ананьин П.С., Баинов Д.Д., Косцын Л.Г., Кривобоков В.П. Установка для нанесения покрытий на поверхность твердых тел «Яшма-2». // Приборы и техника эксперимента. – 2004. – №4. – С. 1–4.
3. Новиков Г.Ф. Явления переноса, электропроводность в диэлектриках. – Воронеж, – 2000 – 203 с.

ИЗУЧЕНИЕ IN SITU ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АТОМАРНОГО ВОДОРОД С ПОВЕРХНОСТЬЮ ТВЕРДЫХ ТЕЛ ЛЮМИНСЦЕНТНЫМИ МЕТОДАМИ

Ван Яомин, Н.Д. Толмачева, Н.Н. Никитенков
Научный руководитель: профессор, д.ф-м.н. Ю.И. Тюрин
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050
E-mail: 601811411@qq.com

IN SITU STUDY OF INTERACTION ATOMIC HYDROGEN WITH A SOLID SURFACE BY LUMINESCENCE METHODS

Wang Yaoming, N.D. Tolmacheva, N.N. Nikitenkov
Supervisor: Professor, D. P- M. S. Yu.I. Tyurin
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050
E-mail: 601811411@qq.com

Abstract. *The low-energy excited electronic states on nonmetal surface under influence of the hydrogen atoms are described using several possible mechanisms. The study results of the luminescence excited surface of the phosphor ZnS-Tm during interaction with H atoms are reported. Nonstationary with time the light intensity from ZnS-Tm is detected. This phenomenon interpreted on basis of the exchange-associative mechanism taking into account the acceleration of the surface recombination of hydrogen atoms in the adsorbed layer of the vibrationally excited hydrogen molecules. The rates of the absorption and recombination of hydrogen atoms and the desorption rate of the hydrogen molecules are defined.*

Введение. Успехи на каждом этапе развития науки о поверхности отражали появление новых методов изучения поверхности, адсорбатов, границ раздела. Явлении гетерогенной хемилюминесценции – процесс высокоэнергетической электронной аккомодации твердым телом энергии гетерогенных химических реакций, протекающих на его поверхности, перенос этой энергии к центрам свечения твердого тела или локализация её непосредственно в адсорбционном комплексе с последующей излучательной релаксацией ГХЛ заложенены разнообразные возможности осуществления экспресс-методов анализа [1].

Методы исследования: Исследования люминесценции ZnS-Tm^{3+} в атомарном водороде проводили на высоковакуумной автоматизированной установке, подробно описанной в [25,26]. Использовали газы: H2 (99,999 %), Свободные атомы водорода H получали диссоциацией полученного электролитически и очищенного молекулярного водорода в безэлектродной плазме ВЧ разряда.

Результат: При напуске атомов H на поверхность ZnS-Tm предварительно очищенную прогревом образца в вакууме 1,30.10–6 Па при 675 К в течение 2 ч и охлажденную до 310 К наблюдается слабая люминесцентная вспышка свечения (полоса 478 нм) с последующим немонотонным ростом интенсивности

люминесценции $I(t)$, рис. 1, кривая 2 Начальный участок кинетической кривой разгорания описывается зависимостью

I(t)=2562705exp(-0.00010874t)-2563626exp(-0.00010879t)+950; (I –отн. ед., t –в с).

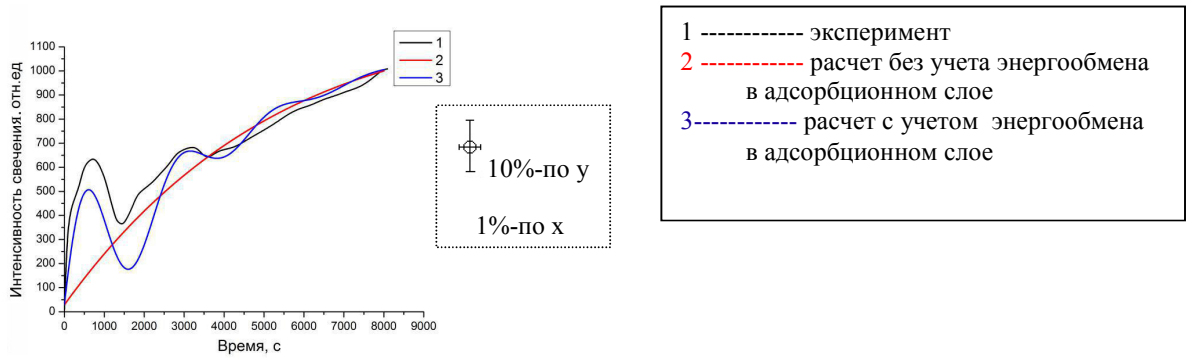


Рис. 1. Кинетическая кривая люминесценции ZnS-Tm в атомарном. Поверхность ZnS-Tm предварительно очищена прогревом образца в вакууме. 1-эксперимент, 2- простейшая аппроксимация кинетической кривой люминесценции модельной зависимостью, 3- аппроксимация кинетической кривой люминесценции с учетом энергообмена в адсорбционном слое. Давление в разрядной трубке $2.2 \cdot 10^{-1}$ торр, температуре образца 318 К

Была изучена люминесценция после предварительной адсорбции атомов Н на поверхности ZnS-Tm. Предадсорбция атомов Н продолжалась 120 мин. из смеси H_2+H при P_{H2+H} =2,2 $*10^{-1}$ торр, при постоянной для всех опытов температуре образца 306 К, рис.2

I(t)=3980exp(-0.00893t) -3473exp(-0.00791t)+507

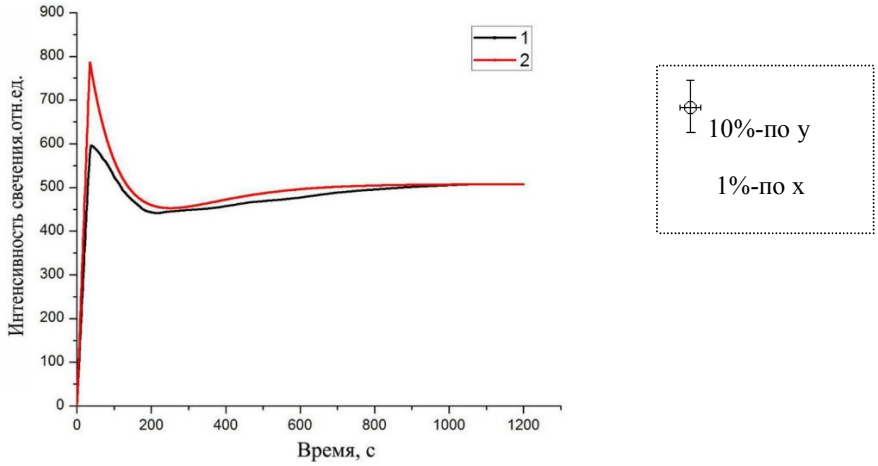


Рис. 2. Аппроксимация кинетической кривой люминесценции (1) рассчетной зависимостью (2) при возбуждении атомами Н поверхности ZnS-Tm с предварительно адсорбированными атомами водорода. После темновой паузы (смесь Н2+Н при P_{H2+H} =2,20·10^{-1} торр, при постоянной для всех опытов температуре образца 306 К, Время снятия точек ФЭУ на графике -через 7,5с)

Модель возбуждения ГХЛ с участием нейтральных форм адсорбции:

Кинетический механизм прямого возбуждения ГХЛ включает следующий минимальный набор элементарных стадий[2]:

$$H + L \xrightarrow{\nu_1} HL; \quad H + HL \xrightarrow{\nu_2,\eta} H_2L + h\nu; \quad H_2 + L \xrightarrow{\nu_{-3}} H_2L;$$

Над стрелками указаны, отнесенные к единице времени, вероятности соответствующих реакций.

$$\nu_i = j\sigma_{i0} \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right) = \sigma_i j, \quad i = 1,2; \quad \nu_{-3} = \nu_{-30} \exp\left(-\frac{q_3 + E_3}{kT}\right);$$

Здесь σ_i, E_i – сечение и энергия активации i-ой реакции; q_3 – теплота адсорбции; ν_{-30} – частотный факторы десорбции молекулы; j_1- плотность потока атомов, η-квантовый выход ГХЛ.

Введем обозначения для поверхностных концентраций в момент времени t: L → $N(t)$, HL → $N_1(t)$, H_2L → $N_2(t)$. Интенсивность РРЛ согласно I–V равна: $I(t) = \eta \nu_2 N_1(t)$

Система кинетических уравнений с наименьшим необходимым числом параметров для описания ГХЛ без учета колебательно-колебательного обмена имеет вид:

$$\frac{dN_1}{dt} = \nu_1 N - \nu_2 N_1, \frac{dN_2}{dt} = \nu_2 N_1 - \nu_{-3} N_2 .$$

Интенсивность люминесценции для произвольных начальных заполнений поверхности атомами и молекулами $N_1(0) = N_{10}$, $N_2(0) = N_{20}$, $N(0) = N_0 - N_{10} - N_{20}$, равна:

$I(t) = \eta \nu_2 N_1(t) =$

$$= \eta \nu_2 \frac{\nu_1 N_0}{r_1 - r_2}\left[(1 + \frac{\nu_{-3}}{r_1} + \frac{(r_1 + \nu_{-3})N_{10}}{\nu_1 N_0} - \frac{N_{20}}{N_0})(e^{r_1 t} - 1) - (1 + \frac{\nu_{-3}}{r_2} + \frac{(r_2 + \nu_{-3})N_{10}}{\nu_1 N_0} - \frac{N_{20}}{N_0})(e^{r_2 t} - 1)\right],$$

Таблица 1

Рассчитанные параметры ν_1, ν_2 и ν_{-3} кинетических кривых 2 рис.1 и 2 рис.2

Относительные вероятности, c^{-1}	ν_1 $H + L \xrightarrow{\nu_1} HL$	ν_2 $H + HL \xrightarrow{\nu_2} H_2L$	ν_{-3} $H_2 + L \xrightarrow{\nu_{-3}} H_2L$
кривая 2, рис.3.2	$2.62 \cdot 10^{-5}$	$1.44 \cdot 10^{-4}$	$4.73 \cdot 10^{-5}$
кривая 2, рис.3.3	$1.40 \cdot 10^{-3}$	$1.10 \cdot 10^{-2}$	$4.40 \cdot 10^{-3}$

Методы, основанные на явлении ГХЛ, дают в руки исследователей чувствительный инструмент изучения химического состава поверхности, эффективности электронных излучательных процессов на поверхности, механизмов переноса энергии и процессов деградации поверхности. На основе явления ГХЛ удается проследить за быстропротекающими процессами в газовой фазе и измерить время жизни свободных атомов и радикалов [3].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Тюрии Ю.И. Хемовозбуждение поверхности твердых тел.//Томск: Изд-во Том.ун-та,2001.381с
2. V. P. Grankin, V. V. Styrov A Luminescence Characterization of Adsorbed Hydrogen Atoms on Plasma Facing Materials, Physica Scripta Vol.T.108,33-37,2004
3. Shigalugov, S.Kh., Luminescence of Solids Surface Excited in Heterogeneous Reactions with Oxygen and Oxygen–Containing Particles, Doctoral Sci.(Phys.–Math.) Dissertation, Tomsk, 2005.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ IN SITU ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ДИФФУЗИИ КИСЛОРОДА В ОКСИДАХ С КИСЛОРОДНОЙ ПРОВОДИМОСТЬЮ

З.С. Винокуров[1,2], Н.Ф.Еремеев[1,2]

Научный руководитель: д.ф.-м.н. А.Н. Шмаков

[1] Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН

Россия, г. Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, 5, 630090

[2] Новосибирский национальный исследовательский государственный университет

Россия, г. Новосибирск, ул. Пирогова, 2, 630090

E-mail: vinzux@mail.ru

USE OF IN SITU XRD FOR STUDYING OF OXYGEN DIFFUSION IN OXYGEN CONDUCTING OXIDES

Z.S. Vinokurov[1,2], N.F. Eremeev[1,2]

Scientific Supervisor: Dr. A.N. Shmakov

[1] Boreskov Institute of Catalysis, Russia, Novosibirsk, pr. Lavrentieva, 5, 630090

[2] Novosibirsk State University, Russia, Novosibirsk, Pirogova str., 2, 630090

E-mail: vinzux@mail.ru

Abstract. *The present work is devoted to the research of structural changes in oxygen conducting materials caused by the oxygen loss in the oxygen-deficient atmosphere. The in situ XRD study was performed using instrumentation of Beamline 6 at the synchrotron radiation facility of the VEPP-3 storage ring (Siberian Synchrotron and Terahertz Radiation Center, Novosibirsk, Russia).*

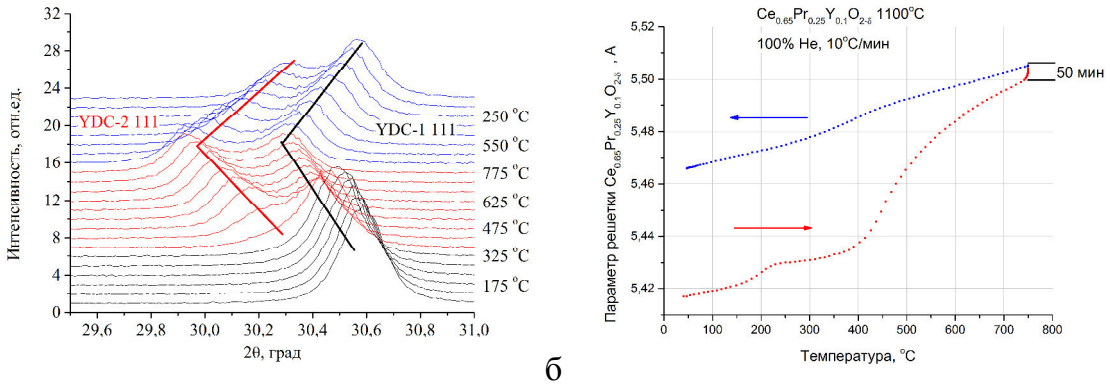
Введение. Оксиды с высокой кислородной проводимостью являются основой твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ), которые, в свою очередь, являются активно развивающейся технологией на сегодняшний день[1]. Их привлекательность обусловлена высокой эффективностью конверсии углеводородных топлив и более высокой экологичностью в сравнении с традиционными источниками энергии на основе углеводородов. В последние годы фокус развития ТОТЭ был направлен на смещение рабочей температуры из области высоких температур 900-1100°C в среднетемпературную область 500-800°C для уменьшения стоимости и увеличения износоустойчивости [2]. Таким образом, в последнее время ведется активный поиск новых эффективных материалов для использования в среднетемпературных ТОТЭ и в первую очередь при синтезе нового материала нас интересуют характеристики кислородной подвижности. В данной работе для исследования процессов диффузии кислорода в сложных оксидах использовался оригинальный метод релаксации объема элементарной ячейки [3]. Метод входит в группу релаксационных методов (методы релаксации массы [4] и проводимости[5]) и использует аналогичные модели и подходы для расчета коэффициентов химической диффузии D_{chem} и константы поверхностного обмена k_{chem}.

Материалы и методы исследования. Нанокристаллические оксиды $Pr_{1-z}Ni_{1-x}Co_xO_{3-\delta}$ (PNC; $x = 0…0{,}6$; $z = 0,\ 0.2$), $Ce_{0.9}Y_{0.1}O_{2-\delta}$ (YDC) и $Ce_{0.65}Pr_{0.25}Y_{0.1}O_{2-\delta}$ (YPDC) были синтезированы методом полимеризованных сложноэфирных предшественников (метод Пекини)[6] с последующим отжигом при

700 – 1300 °C на воздухе в течение 2ч. Нанокомпозиты $PN_{1-x}C$-YDC приготавливались ультразвуковым диспергированием смеси порошков перовскита и флюорита в равных соотношениях в пропаноле-2 с добавкой 1% поливинилбутираля с использованием T25 (ULTRA-TURRAX IKA, Germany) и последующим отжигом на воздухе при соответствующей температуре.

Эксперименты по in situ рентгеновской дифракции проводились на станции «Прецизионная дифрактометрия II», входящей в состав ЦКП «Сибирский Центр Синхротронного и Терагерцового Излучения» (ФГБУН Институт ядерной физики СО РАН, Новосибирск). Образцы загружались в высокотемпературную рентгеновскую камеру-реактор XRK 900 (производства Anton Paar). Далее с помощью автоматизированной системы напуска газов в камеру-реактор подавали газовую смесь необходимого состава, нагревали до определенной температуры, после чего смесь менялась и с помощью позиционно чувствительного беспараллаксного детектора ОД-3М (производства ИЯФ СО РАН, [7]) регистрировались дифрактограммы образца. Контроль состава газа производился с помощью масс-спектрометра UGA-100 (Stanford Research Systems, USA). Кроме того, для аттестации образцов привлекались методы электронной микроскопии (ПЭМ) с энергодисперсионным анализом EDX, метод релаксации массы, а также метод изотопного обмена с $^{18}O_2$ и $C^{18}O_2$.

Результаты. Данные по in situ рентгеновской дифракции для нанокомпозитов $PN_{1-x}C$-YDC показали наличие двух фаз флюорита с различным поведением в кислород-дефицитной среде. Как видно из рисунка 1,а параметр фазы YDC-1 практически не меняется после нагрева в атмосфере гелия, тогда как рефлекс фазы YDC-2 сместился в сторону меньших углов, что, как мы предположили, было связано с выходом кислорода из структуры второй фазы.



а б

Рис. 1.а — Дифрактограммы $PrNi_{0.5}Co_{0.5}O_{3-\delta}$-YDC 930°C в области расположения рефлексов 111 фаз флюорита при нагреве и последующем охлаждении в атмосфере 100%He. Длина волны 1.6475 Å. б — Изменение параметра элементарной ячейки для YPDC при нагреве/охлаждении в гелии.

Данные рентгеновской энергодисперсионной спектроскопии показали наличие в нанокомпозитах $PN_{1-x}C$-YDC доменов флюорита с высоким содержанием празеодима. На основе этого было сделано предположение о том, что именно внедрение празеодима привело к высокой подвижности решеточного кислорода. Это предположение было подтверждено проведением аналогичного эксперимента для отдельных флюоритов YDC и YPDC, который показал вклад химического расширения решетки при нагреве в гелии для YPDC (рис.1,б) и отсутствие такового для YDC.

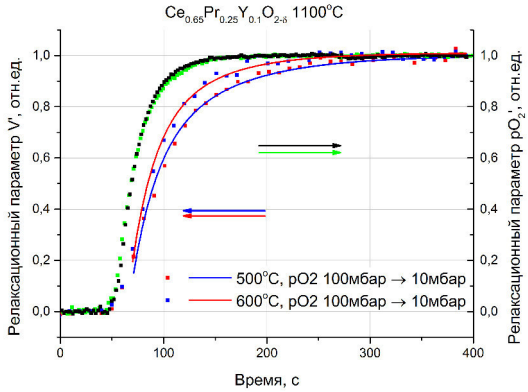


Рис. 2. Кривые релаксации приведенного объема элементарной ячейки образца полученные для $Ce_{0.65}Pr_{0.25}Y_{0.1}O_{2-\delta}$ при изменении парциального давления кислорода со 100 мбар до 10 мбар при заданной температуре. Сплошными линиями указаны расчетные кривые для определения коэффициентов подвижности кислорода.

Для образца YPDC были получены релаксационные кривые (рис. 2), и по ним были рассчитаны коэффициенты поверхностного обмена, которые составили $\log(k_{chem}/[\text{см с}^{-1}]) = -5.3$ и -5.0 для 500°C и 600°C, соответственно.

Заключение. Было показано, что кислородный транспорт в нанокомпозите $PN_{1-x}C$-YDC определяется прежде всего доменами флюорита, что также согласуется с предположением, что внедрение празеодима в домены флюорита формирует дополнительные кислородные вакансии и играет важную роль в процессе диффузии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Carter, D., Wing, J. The fuel cell industry review // Fuel Cell Today – 2013 – p. 1–46
2. Jacobson A. J. Materials for Solid Oxide Fuel Cells // Chem. Mater. – 2010 – Vol. 22 – No. 3 – p. 660-674
3. Sadykov V., Okhlupin Yu. et al. In situ X-ray diffraction studies of $Pr_{2-x}NiO_{4+\delta}$ crystal structure relaxation caused by oxygen loss // Solid State Ionics – 2014 – Vol. 262 – p. 918–922.
4. Katsuki M., Wang Sh., et al. High temperature properties of $La_{0.6}Sr_{0.4}Co_{0.8}Fe_{0.2}O_{3-delta}$ oxygen nonstoichiometry and chemical diffusion constant // Solid State Ionics – 2003 – Vol. 156 – p. 453.
5. Okhlupin Yu.S., Anan'ev M.V. et al. The Effect of Phase Composition on the Transport Properties of Composites $La_{0.8}Sr_{0.2}Fe_{0.7}Ni_{0.3}O_{3-\delta}$–$Ce_{0.9}Gd_{0.1}O_{1.95}$ // Russ. J. Electrochem. – 2011 – Vol. 47 – p. 663.
6. Sadykov V., Usoltsev V. et al. Functional Nanoceramics for Intermediate Temperature Solid Oxide Fuel Cells and Oxygen Separation Membranes // J. Eur. Ceram. Soc. – 2013 – Vol.33 – p 2241.
7. Aulchenko V.M., Evdokov O.V. et al. One-coordinate X-ray detector OD-3M // Nucl. Instrum. Methods. Res. A – 2009 – Vol. 603 – p. 76–79.

ОРИЕНТАЦИОННАЯ И ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ В МОНОКРИСТАЛЛАХ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНОГО СПЛАВА $FeNiCoCrAl_{0,3}$

А.В. Выродова, В.В. Поклонов, З.В. Победенная
Научный руководитель: гл.н.с., д.ф.-м.н. И.В. Киреева, профессор, д.ф.-м.н. Ю.И. Чумляков
Национальный исследовательский Томский государственный университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина 36, 634050
E-mail: wirodowa@mail.ru

THE ORINTATION AND TEMPERATURE DEPENDECE OF THE PLASTIC DEFORMATION IN SINGLE CRYSTALS OF HIGH ENTROPY ALLOY $FeNiCoCrAl_{0,3}$

A.V. Vyrodova, V.V. Poklonov, Z.V. Pobedennaya
Scientific Supervisor: chief researcher, Dr. I.V. Kireeva, Prof., Dr. Yu.I. Chumlaykov
National Research Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenina Str.36, 634050
E-mail: wirodowa@mail.ru

Abstract. *The temperature dependence of flow curves σ(ε), plasticity and strain hardening coefficient investigated in [001]- and [$\bar{1}$ 11]-oriented single crystals of FCC HEA $FeNiCoCrAl_{0,3}$ in tension deformation. It is shown that the strain hardening coefficient $\Theta_{II} = d\sigma/d\varepsilon$ depends on the crystal orientation, and the value of Θ_{II}/G is less than the value of $\Theta_{II}/G = 4\times10^{-3}$ for FCC pure metals and their substitutional alloy in the slip deformation.*

Введение. Традиционное создание новых материалов заключается в легировании одного основного элемента для получения желаемых механических и технологических свойств. В последние годы особый интерес представляет новый класс металлических соединений, в основе которых лежит не менее пяти основных элементов в равных атомных пропорциях. Такие многокомпонентные сплавы получили название высокоэнтропийные из-за наличия в них высокой энтропии смешения [1]. Главной особенностью высокоэнтропийных сплавов (ВЭС) является образование неупорядоченных твердых растворов преимущественно с гранецентрированной кубической (ГЦК) или объемно-центрированной кубической (ОЦК) решеткой, стабилизация которых обеспечивается высокой энтропией смешения. Основными свойствами этих сплавов является: высокотемпературная прочность, коррозийная стойкость, хорошая низкотемпературная пластичность. В литературе известно несколько работ на монокристаллах ВЭС $FeNiCoCrAl_{0,3}$, в которых исследованы механизм разрушения, твердость и модуль упругости монокристаллов [001]-ориентации при растяжении [1, 2] и асимметрия механических свойств при растяжении/сжатии [3]. Целью данной работы является исследование ориентационной зависимости пластической деформации на монокристаллах ВЭС $FeNiCoCrAl_{0,3}$ [001] и [$\bar{1}$ 11] ориентаций.

Материалы и методы исследования. Монокристаллы ГЦК ВЭС $FeNiCoCrAl_{0,3}$ выращивали методом Бриджмена в атмосфере аргона из заготовок, выплавленных в печи сопротивления. Монокристаллы после роста гомогенизировали в атмосфере инертного газа при T = 1473 К в течение 24 часов и затем закаливали в воду. Образцы в форме двойной лопатки вырезали на электроискровом станке. Поврежденный поверхностный слой удаляли механической шлифовкой и затем полировали в

электролите 200 мл H_3PO_4 + 50 г CrO_3. Ориентацию определяли на дифрактометре ДРОН-3М. Поверхность образцов после деформации 5 % исследовали на оптическом микроскопе Keyence. Механические испытания в интервале температур от 77 до 573 К проводили на испытательной машине Instron 5969. Критические скалывающие напряжения вычисляли, используя выражение $\tau_{кр}^{ск} = \sigma_{0,1} \times m_{ск}$ ($\sigma_{0,1}$ – осевые напряжения на пределе текучести, $m_{ск}$ – фактор Шмида для скольжения), $m_{ск}$ = 0,41 для [001]-кристаллов, $m_{ск}$ = 0,27 для [$\bar{1}$11]-кристаллов [4].

Результаты эксперимента и их обсуждение. На рис. 1 приведены кривые течения σ(ε) для [001]- и [$\bar{1}$11]-монокристаллов ВЭС $FeNiCoCrAl_{0,3}$ в интервале температур от 203 К до 296 К. Видно, что при всех температурах испытания деформация ε развивается в одну линейную стадию. Анализ данных, представленных на рис. 1 и в таблице, показывает, во-первых, с понижением температуры испытания напряжения $\sigma_{0,1}$ и, соответственно, $\tau_{кр}^{ск}$ увеличиваются. При одной температуре испытания $\tau_{кр}^{ск}$ не зависят от ориентации кристалла. Следовательно, в монокристаллах ВЭС $FeNiCoCrAl_{0,3}$ выполняется закон Боаса-Шмида, что является типичным поведением для ГЦК чистых металлов и их сплавов замещения [5].

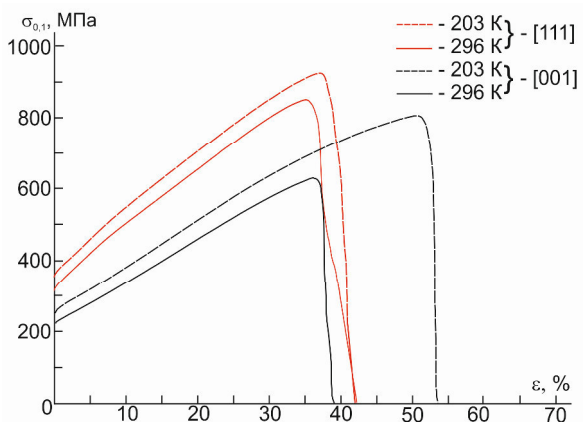


Рис. 1. Кривые течения [001]- и [$\bar{1}$11]-монокристаллов высокоэнтропийного сплава $FeNiCoCrAl_{0,3}$ (ат. %) при деформации растяжением

Таблица

Сравнение механических свойств монокристаллов высокоэнтропийного сплава $FeNiCoCrAl_{0,3}$

Ориентация	$m_{ск}$	$\sigma_{0,1}$, МПа		$\tau_{кр}$, МПа		ε, %		σ_{max}, МПа		$\Theta_{II} = d\sigma/d\varepsilon$, МПа		$(d\tau/d\gamma)/G \times 10^{-3}$	
		296 К	203 К	296 К	203 К	296 К	203 К	296 К	203 К	296 К	203 К	296 К	203 К
[001]	0,41	220	250	90	102	37	50	620	800	1200	1300	2,52	2,73
[$\bar{1}$11]	0,27	310	355	84	96	35	37	850	920	1500	1650	1,36	1,5

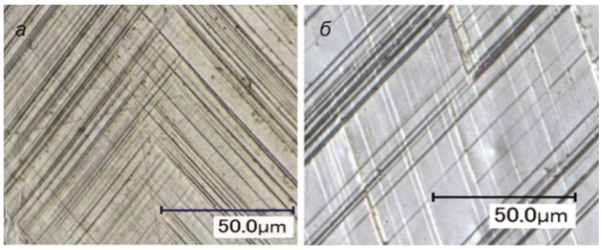


Рис. 2. Металлографическая картина следов скольжения на поверхности монокристаллов высокоэнтропийного сплава $FeNiCoCrAl_{0,3}$ при растяжении: $T_{исп}$ = 296 К, ε = 5 %, а – [001], б – [$\bar{1}$11]

Во-вторых, пластическое течение в [001]- и [$\bar{1}$11]-кристаллах с самого начала развивается с высоким $\Theta_{II} = d\sigma/d\varepsilon$ в нескольких системах скольжения (рис. 2), поскольку кристаллы ориентированы для множественного сдвига.

Как правило, величина Θ_{II}/G (G = 80 ГПа – модуль сдвига для ВЭС $FeNiCoCrAl_{0,3}$) для ГЦК чистых металлов и их сплавов замещения при деформации скольжением не зависит от температуры испытания и ориентации кристалла и по величине для всех ориентаций оказывается близкой к 4×10^{-3} [5]. Для того чтобы сравнить Θ_{II} монокристаллов ВЭС $FeNiCoCrAl_{0,3}$ с

величиной $\Theta_{II}/G = 4\times10^{-3}$ для ГЦК чистых металлов и их сплавов замещения Θ_{II} представили как $(d\tau/d\gamma)/G$ ($\tau = \sigma\times m_{ск}$ – критические скалывающие напряжения при соответствующей сдвиговой деформации $\gamma = \varepsilon/m_{ск}$). Значения $(d\tau/d\gamma)/G$ представлены в таблице, из которой видно, что в монокристаллах ВЭС $FeNiCoCrAl_{0,3}$ $\Theta_{II}/G = (d\tau/d\gamma)/G$ зависит от ориентации кристалла и для одной ориентации слабо зависит от температуры испытания, а по величине оказывается меньше, чем $\Theta_{II}/G = 4\times10^{-3}$ для ГЦК чистых металлов и их сплавов замещения. В-третьих, пластичность в [001]- и $[\bar{1}11]$-кристаллах при $T = 296$ К не зависит от ориентации кристалла и с понижением температуры испытания до 203 К возрастает. В ходе пластической деформации достигаются напряжения разрушения σ_{max}, которые зависят от ориентации кристалла и наибольшие σ_{max} достигаются в кристаллах, ориентированных вдоль $[\bar{1}11]$ направления (рис. 1, таблица). Электронномикроскопические исследования деформированных до 5 % при $T = 296$ К [001]- и $[\bar{1}11]$-кристаллов ВЭС $FeNiCoCrAl_{0,3}$ показывают, что в них развивается планарная дислокационная структура, состоящая из плоских скоплений дислокаций (рис. 3).

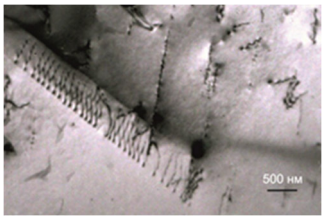


Рис. 3. Дислокационная структура деформированных до 5 % [001]-монокристаллов высокоэнтропийного сплава $FeNiCoCrAl_{0,3}$ при растяжении при $T = 296$ К

Развитие планарной структуры в монокристаллах ВЭС $FeNiCoCrAl_{0,3}$ объясняет развитие пластического течения в этих кристаллах с меньшим Θ_{II}/G, чем $\Theta_{II}/G = 4\times10^{-3}$ для ГЦК чистых металлов и их сплавов замещения и увеличение пластичности с понижением температуры испытания.

Заключение. Экспериментальные исследования на монокристаллах [001] и $[\bar{1}11]$ ВЭС $FeNiCoCrAl_{0,3}$ (ат. %) показывают, что пластическое течение при растяжении в них развивается с коэффициентом деформационного упрочнения Θ_{II}, который зависит от ориентации оси кристалла и слабо зависит от температуры испытания в кристаллах одной ориентации. Θ_{II}/G, оказывается меньше, чем $\Theta_{II}/G = 4\times10^{-3}$ для ГЦК чистых металлов и их сплавов замещения. Физическая причина уменьшения Θ_{II}/G в монокристаллах ВЭС $FeNiCoCrAl_{0,3}$ связана с развитием планарной дислокационной структуры.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ: № 16-19-10193.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ma S.G, Zhang S.F, Qiao J.W., et. al. Superior gigh tensile elongation of a single-crystal $CoCrFeNiAl_{0,3}$ high-entropy alloy by Bridgman solidification // Intermetallics. – 2014. – V. 54. – P. 104–109.
2. Yasuda H.Y., Shigeno K., Nagase T. Dynamic strain aging of Al0,3CoCrFeNi high entropy alloy single crystals // Scripta Mater. – 2015. – V. 108. – P. 80-83.
3. J. Joseph, N. Stanford, P. Hodgson, et. al. Tension/compression asymmetry in additive manufactured face centered cubic high entropy alloy // Scripta Mater. – 2017. – V. 129. – P. 30-34.
4. Вишняков Я.Д., Бабарэко А.А. Владимиров С.А. и др. Теория образования текстур в металлах и сплавах. – Москва: Из-во Наука, 1979. – 342 с.
5. Бернер Р., Кронмюллер Г. Пластическая деформация монокристаллов. – Москва: Из-во Мир, 1969. – 272 с.

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ОБЪЕМА И ПОВЕРХНОСТИ ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ GdY_2Si_2 (Y = Cu, Ag, Au)

А.Ю. Вязовская

Научный руководитель: доцент, к.ф.-м.н. В.М. Кузнецов

Национальный Исследовательский Томский Государственный Университет

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

E-mail: alex_vyaz93@mail.ru

BULK AND SURFACE ELECTRONIC STRUCTURE OF THE GdY_2Si_2 COMPOUNDS (Y = Cu, Ag, Au)

A.Yu. Vyazovskaya

Scientific Supervisor: Associate Prof., Ph.D. V.M. Kuznetsov

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

E-mail: alex_vyaz93@mail.ru

Abstract. *The results of ab initio study of the bulk and surface electronic structure of the GdY_2Si_2 compounds (Y = Cu, Ag, Au) are presented in this work. Our electronic band structure calculations have shown that the silicon-terminated surface of GdY_2Si_2 bears two distinct two-dimensional electron states, one being a Shockley surface state, and the other – a surface resonance. We demonstrate that the appearance of the surface resonance state is caused by a layered crystal structure of the GdY_2Si_2 compounds.*

Введение. На протяжении многих лет интерметаллиды REY_2X_2, сочетающие в себе благородный и переходный (либо редкоземельный) элементы (Y и RE соответственно), являются платформой для наблюдения таких свойств, как флуктуации валентности, сверхпроводимость, а также квантовое критическое поведение и эффект Кондо [1, 2]. Примерами таких соединений являются REY_2X_2 (X = Si, Ge). На настоящий момент проведено большое число исследований магнетизма систем REY_2X_2, где RE – это редкоземельный элемент, Y – переходный 3d, 4d, 5d или благородный металл, а X – как правило, Si либо Ge (редко – Sn), однако электронная структура их поверхности слабо изучена. Имеющиеся фотоэмиссионные даннные свидетельствуют о том, что электронный спектр кремниевой поверхности содержит как Шоклиевские состояния типа «оборванная связь», располагающиеся в локальной щели в окрестности точки $\overline{\mathrm{M}}$, так и резонансные состояния с линейной дисперсией в точке $\overline{\Gamma}$, как известно на примере $EuRh_2Si_2$ и $GdRh_2Si_2$ [3, 4]. Ожидается, что спиновое расщепление исследуемых состояний на поверхностях REY_2X_2 будет зависеть от компонент соединения: как от RE-, так и от Y-подрешетки. Следовательно, спин-орбитальное и обменное расщепление поверхностных состояний могут изменяться от практически чисто обменного или спин-орбитального расщеплений (СОР) до их комбинации за счет изменения компонентного состава REY_2X_2. Практический интерес представляет комбинация обменного и спин-орбитального расщеплений. Считается, что интерфейсные состояния такого типа играют важную роль в процессе переключения намагниченности, индуцируемом электрическим током в гетероструктурах ферромагнетик/тяжелый металл, которые могут быть использованы в качестве магнитных записывающих сред.

Целью настоящей работы является первопринципное исследование влияния на поверхностную электронную структуру соединений $RE Y_2Si_2$ спин-орбитальных эффектов. Соединение, демонстрирующее наиболее сильное спин-орбитальное взаимодействие, выбирается в качестве базового. Для исследования спин-орбитальных эффектов рассматриваются антиферромагнетики IV-го типа $Gd Y_2Si_2$ (Y = Cu, Ag, Au), с акцентом на исследование поверхностной электронной структуры $GdAu_2Si_2$ (в особенности – резонансного состояния в точке $\bar{\Gamma}$), что обусловлено наличием у Au, как у более тяжелого элемента, большего спин-орбитального взаимодействия (СОВ), чем у Ag и Cu.

Метод исследования. Расчеты проводились в рамках метода проекционных плоских волн, имплементированного в коде VASP [5, 6]. Для учета обменно-корреляционных эффектов использовалось обобщенное градиентное приближение в форме Пердью-Бурка-Эрнзерхофа. В гамильтониан были включены скалярно-релятивистские поправки, а спин-орбитальное взаимодействие учитывалось по методу второй вариации. При расчетах использовались асимметричные пленки, терминированные либо слоем Si, либо Gd, так как известно, что при сколе объемного кристалла $Gd Y_2Si_2$ образуются поверхности этих типов [3, 4].

Результаты. Анализ результатов расчета электронной структуры поверхности $GdAu_2Si_2$, в котором *f*-электроны Gd включены в число валентных, показал, что обменное расщепление в обсуждаемых состояниях отсутствует. Это позволяет не учитывать антиферромагнитное упорядочение рассматриваемых соединений и при дальнейших расчетах перейти к рассмотрению парамагнитного случая, включив *f*-электроны Gd в атомный остов. На рисунке 1 приведена электронная структура поверхности $GdAu_2Si_2$, рассчитанная вдоль симметричных направлений $-\bar{X} \to \bar{\Gamma} \to \bar{X}$ двумерной зоны Бриллюэна для пленки толщиной в 32 атомных слоя с учетом СОВ. Для выделения интересующих состояний из множества зон пленочного спектра отображается спиновая текстура зон, для которых разрешенные по *k*-вектору плотности электронных состояний (ПЭС), проектированные в сферы Вигнера-Зейтца, максимальны на втором атомном слое золота Si-терминированной поверхности. В изображенном интервале энергии видны две зоны с высокой ПЭС – электронная и дырочная – приходящие в точку $\bar{\Gamma}$ при энергиях –1.8 и –1.4 эВ, соответственно, и расщепленные по типу Бычкова-Рашбы. Заметим, что константа Бычкова-Рашбы α_R в данном случае не является хорошо определенной величиной. Действительно, расчеты, проведенные в отсутствие СОВ, свидетельствуют о вырождении данных зон в точке $\bar{\Gamma}$, которое снимается при введении СОВ, т.е. возникает собственное СОР величиной около 0.38 эВ. Последнее приводит к так называемой инвертации зон в окрестности точки $\bar{\Gamma}$, где верхняя зона меняет поведение с электронного на дырочное, что затрудняет определение констант для обеих зон, испытывающих СОР. Анализ орбитального состава показал, что Au $5d_{yz}(5d_{xz})$-орбитали α_R вносят основной вклад в электронные (дырочные) зоны, за исключением окрестности точки $\bar{\Gamma}$, представленной преимущественно $5d_{xz}(5d_{yz})$-орбиталями.

Слои атомов Si, располагающиеся над и под слоем Au, также дают значительный вклад в указанные состояния вследствие *p*-*d*-гибридизации. Интересно, что дисперсия рассматриваемых состояний фактически оформляется уже при толщине пленки в 4 атомных слоя: в трехслойном блоке Si – Au – Si возникают СОР и инвертация зон, а добавление слоя атомов Gd приводит к расщеплению по типу Бычкова-Рашбы.

Выводы. Локализация электронной и дырочной зон в прослойке Si – Au – Si, чередующейся с

монослойными вставками Gd, объясняет их резонансный характер, наблюдаемый в экспериментах на схожих соединениях [3, 4]. Отметим также, что вблизи точки $\bar{\Gamma}$ дырочное состояние демонстрирует параболическую дисперсию, а при конечных k – линейную, вследствие чего в работе [2] для его обозначения использовался термин «конус Дирака». Поверхности GdY_2Si_2 (Y = Cu, Ag) демонстрируют схожее электронное строение, но с меньшим СОР. Таким образом, поверхность $GdAu_2Si_2$ демонстрирует необычное электронное строение и является кандидатом для изучения эффектов спин-орбиты и магнетизма.

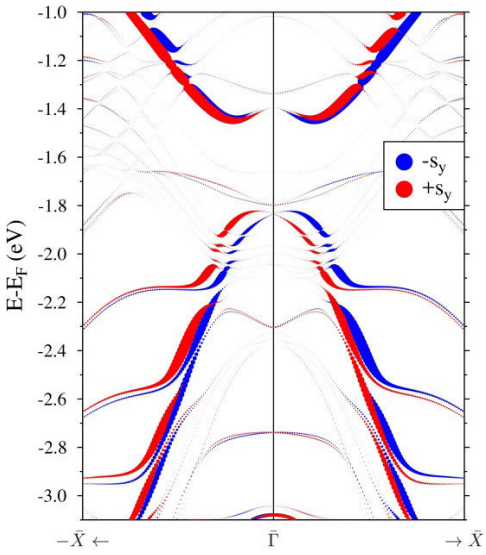


Рис. 1. Электронная структура поверхности $GdAu_2Si_2$, рассчитанная вдоль симметричных направлений $-\bar{X} \to \bar{\Gamma} \to \bar{X}$ двумерной зоны Бриллюэна для пленки толщиной в 32 атомных слоя с учетом СОВ

Работа выполнена под руководством к.ф.-м.н. М. М. Отрокова.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Steglich F. Superconductivity in the Presence of Strong Pauli Paramagnetism: $CeCu_2Si_2$ / F. Steglich, J. Aarts, C. D. Bredl et al. // Phys. Rev. Lett. – 1979. – V. 43. – № 25. – P. 1892–1896.
2. Trovarelli O. YbRh2Si2: Pronounced Non-Fermi-Liquid Effects above a Low-Lying Magnetic Phase Transition / O. Trovarelli, C. Geibel, S. Mederle et al. // Phys. Rev. Lett. – 2000. – V. 85. – № 3. – P. 626–629.
3. Chikina A. Strong ferromagnetism at the surface of an antiferromagnet caused by buried magnetic moments / A. Chikina, M. Höppner, S. Seiro et al. // Nature Communication. – 2014. – V. 5. – № 3171. – P. 1–5.
4. Güttler M. Robust and tunable itinerant ferromagnetism at the silicon surface of the antiferromagnet $GdRh_2Si_2$ / M. Güttler, A. Generalov, M. M. Otrokov et al. // Scientific Reports. – 2016 – V. 6. – P. 24254.
5. Kresse G. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set / G. Kresse, J. Furthmüller // Phys. Rev. B. – 1996. – V. 54. – № 16. – P. 11169–11186.
6. Kresse G. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method / G. Kresse, D. Joubert // Phys. Rev. B. – 1998. – V. 59. – № 3. – P. 1758–1775.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИЗУЧЕНИЕ ТЕНЗОРНОЙ АНАЛИЗИРУЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ РЕАКЦИИ $\gamma d \to pp\pi^-$

В.В. Гаузштейн, 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

EXPERIMENTAL STUDY OF THE TENSOR ANALYZING POWER IN THE REACTION $\gamma d \to pp\pi^-$

V.V. Gauzshtein, 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**. Results of a simultaneous measurement of the three components of the tensor analyzing power of the reaction of exclusive photoproduction of π^- mesons on deuterons in the photon energy region 300– 900 MeV and the proton energy region (50 – 200) 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.*

Введение. Эксперименты по исследованию тензорных анализирующих способностей в фотореакциях на малонуклонных системах в течение многих лет проводятся на накопителе ВЭПП-3 в ИЯФ СО РАН им. Будкера. Первые измерения T_{20} и T_{22} компонент тензорной анализирующей способности были выполнены в 1992 г. [1], однако малая статистика накопленных экспериментальных данных не позволяет провести корректное сравнение с теоретическими расчетами. В работе [2] измерена асимметрия фоторождения пи-минус мезонов по отношению к смене знака тензорной поляризации мишени, обусловленная вкладом T_{21} компоненты. В этом докладе представлены результаты одновременного измерения T_{20}, T_{21} и T_{22} компонент тензорной анализирующей способности фотообразования π^--мезонов на дейтронах.

Постановка эксперимента. Измерения были выполнены на накопителе электронов ВЭПП-3, общая схема эксперимента приведена на рис. 1. Детектирующая система проектировалась для регистрации фоторасщепления дейтрона [3], где нейтроны регистрируются верхним плечом, а нейтроны 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 #2. Результаты измерения асимметрии выходов по отношению к смене знака тензорной поляризации дейтронов и были использованы для расчета компонент тензорной анализирующей способности реакции $\gamma d \to pp\pi^-$. Для определения средней степени поляризации дейтронов в ячейке использовался канал реакции упругого ed-рассеяния при малом переданном импульсе [4]. Для этого был установлен сцинтилляционный детектор, регистрирующий рассеянный

электрон под углом ~ 9°. Электрон регистрировался на совпадении с дейтроном отдачи, который регистрировался нижним плечом #2. 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. Дрейфовые камеры предназначены для измерения углов вылета протонов в нижнем плече. Вершинная камера регистрирует вершину взаимодействия, перпендикулярную оси пучка электронов и азимутальный угол [3]. В условиях эксперимента погрешность измерения углов вылета протонов составила 0.5°.

Энергетический диапазон регистрации протонов в нижнем плече разбивается на два интервала, определяемых сцинтиллятором, в котором остановился зарегистрированный протон. Если протон останавливается во втором сцинтилляторе, то его энергия (50 – 145) МэВ, если в третьем, то (145 – 200) МэВ.

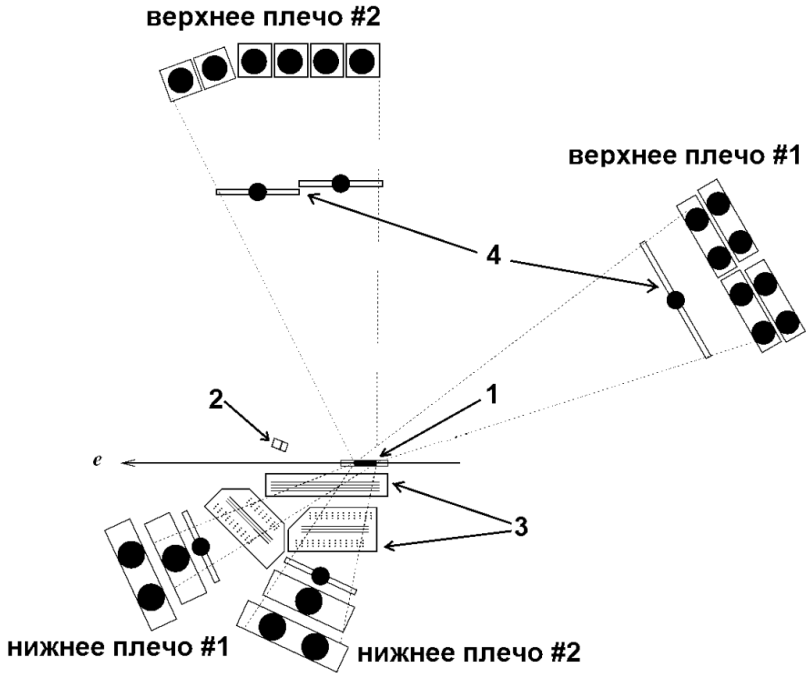


Рис. 1. Схема размещения детектирующей аппаратуры эксперимента: 1 – мишень, 2 – LQ-поляриметр, 3 – дрейфовые камеры, 4 – тонкие сцинтилляционные счетчики

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.

Результаты измерений. Идентификация протонов в нижнем плече осуществлялась путём анализа амплитуд сигналов ФЭУ с двух следующих друг за другом слоев сцинтилляторов [5]. Фоновыми частицами в этом плече являются дейтроны, электроны и заряженные пи-мезоны. Идентификация

протонов в верхнем плече осуществляется время-пролетной методикой при наличии сигнала в тонком сцинтилляционном счетчике (условие пролета заряженной частицы). Здесь фоновыми частицами являются электроны и заряженные пи-мезоны. Кинетическая энергия протона, зарегистрированного в нижнем плече, определялась из анализа амплитуд сигналов с ФЭУ двух, следующих друг за другом, сцинтилляторов. Погрешность измерения энергии протонов в нижнем плече не превышает 10%. Энергия протона в верхнем плече определялась по времени пролета от мишени до сцинтиллятора.

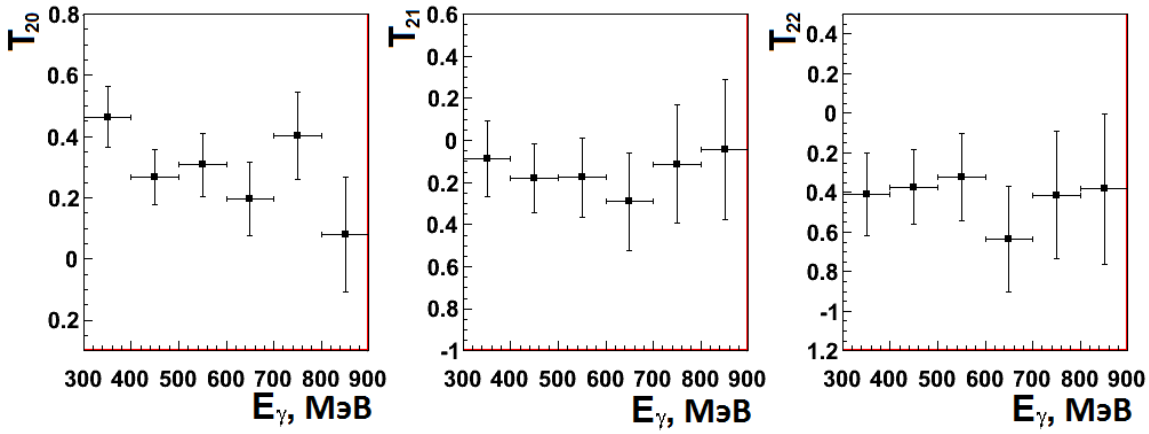


Рис. 2. Зависимость компонент тензорной анализирующей способности реакции $\gamma d \to pp\pi^-$ от энергии виртуального фотона

Результаты эксперимента представлены на рис. 2. Показаны зависимости трех компонент тензорной анализирующей способности реакции $\gamma d \to pp\pi^-$ от энергии виртуального фотона.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №15-02-00570.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Loginov A.Yu., Osipov A.V., Sidorov A.A. et al. Investigation of the reaction $D(e,pp)e'\pi^-$ on a tensor polarized deuterium target at high proton momenta // Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters. – 1998. – Т. 67. – № 10. – С. 770-776.
2. Барков Л.М., Гаузштейн В.В., Дмитриев В.Ф. и др. Тензорная асимметрия в реакции фотообразования π^--мезонов на поляризованных дейтронах // Известия РАН. Серия Физическая. – 2010. – Т. 74. – № 6. – С. 780-783.
3. Rachek I.A., Barkov L.M., Belostotsky S.L. et al. Measurement of tensor analyzing powers in deuteron photodisintegration // Physical Review Letters. – 2007. – V. 98. – N. 17. – 182303
4. Dyug M.V., Lazarenko B.A., Mishnev S.I. et al. Deuterium target polarimeter at the VEPP-3 storage ring // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A. – 2005. – Т. 536. – № 3. – С. 344 –349.
5. Гаузштейн В.В., Зеваков С.А., Логинов А.Ю. и др. Измерение компонент тензорной анализирующей способности реакции $\gamma d \to pp\pi^-$ при больших импульсах протонов // Ядерная Физика. – 2015. – Т. 78. – № 1-2. – С. 3.

ВЛИЯНИЕ РАЗМЕРОВ ТРАПЕЦИЕВИДНОГО ЛОКАЛЬНОГО ИСТОЧНИКА ЭНЕРГИИ НА ЭВОЛЮЦИЮ ЛАМИНАРНЫХ ТЕПЛОВЫХ ФАКЕЛОВ В ЗАМКНУТЫХ КОНТУРАХ

Н.С. Гибанов
Научный руководитель: доцент, д.ф.-м.н. М.А. Шеремет
Национальный исследовательский Томский государственный университет
Россия, г. Томск, пр. Ленина 36, 634050
Email: Fire9n@mail.ru

EFFECT OF TRAPEZOIDAL DISCRETE HEATER SIZES ON EVOLUTION OF LAMINAR THERMAL PLUMES IN ENCLOSURES

N.S. Gibanov
Scientific supervisor: Assoc. Prof, Dr. M.A. Sheremet
National Research Tomsk State University, Russia, Tomsk, 36 Lenin avenue, 634050
Email: Fire9n@mail.ru

Abstract. *In this study, numerical simulation of unsteady laminar natural convection in a cubical cavity having discrete heat source of a trapezoidal shape has been carried out. Governing equations describing fluid flow and heat and mass transfer within the considered area have been represented using the dimensionless vector potential functions, vorticity vector and temperature. Distributions of velocity and temperature fields inside the domain of interest have been obtained. All calculations have been conducted in a wide range of Rayleigh number and heater size.*

Введение. Задачи конвективного теплообмена являются наиболее востребованными среди исследователей всего мира в связи с разработкой технических устройств широкого профиля, в которых конвекция представляется определяющим механизмом переноса энергии [1]. Одним из наиболее важных направлений является охлаждение рабочих элементов и блоков радиоэлектронной аппаратуры и электронной техники.

Целью представленной работы является численный анализ ламинарных нестационарных режимов естественной конвекции в замкнутом кубическом контуре при наличии локального источника энергии трапециевидной формы, а также исследование эволюции тепловых потоков и особенностей течения среды в области при изменении размеров тепловыделяющего элемента.

Физическая и математическая постановка. Проводится математическое моделирование естественной конвекции в замкнутой кубической полости, показанной на рисунке 1. На нижней стенке расположен локальный источник энергии трапециевидной формы, размеры которого в процессе исследования менялись в диапазоне: $0.01 \le v / V \le 0.135$, где v – объем локального источника тепловыделения, V – объем всей рассматриваемой полости. Боковые вертикальные стенки ($x = 0$, $x = L$) являются охлаждающими. Остальные стенки считаются адиабатическими. Внутри рассматриваемой полости находится газ, который считался несжимаемой ньютоновской жидкостью, удовлетворяющей приближению Буссинеска, с постоянными остальными теплофизическими параметрами [2–4].

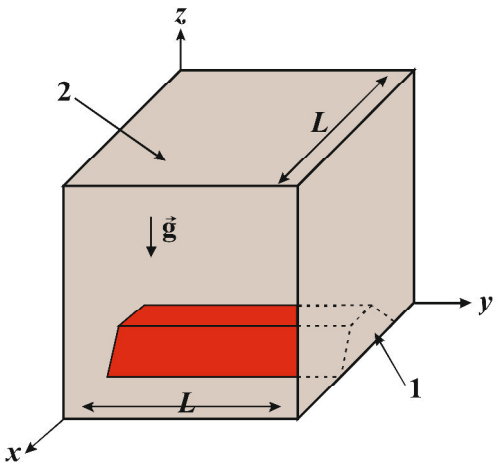


Рис. 1. Область исследования (1 – источник тепловыделения, 2 – полость)

Процессы тепломассопереноса в исследуемом замкнутом контуре описываются системой нестационарных пространственных уравнений Обербека–Буссинеска, записанных с помощью преобразованных переменных «векторный потенциал – вектор завихренности - температура» [5]:

$$\frac{\partial \Omega_x}{\partial \tau}+U\frac{\partial \Omega_x}{\partial X}+V\frac{\partial \Omega_x}{\partial Y}+W\frac{\partial \Omega_x}{\partial Z}-\Omega_x\frac{\partial U}{\partial X}-\Omega_y\frac{\partial U}{\partial Y}-\Omega_z\frac{\partial U}{\partial Z}=\sqrt{\frac{Pr}{Ra}}\nabla^2\Omega_x+\frac{\partial \Theta}{\partial Y}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \Omega_y}{\partial \tau}+U\frac{\partial \Omega_y}{\partial X}+V\frac{\partial \Omega_y}{\partial Y}+W\frac{\partial \Omega_y}{\partial Z}-\Omega_x\frac{\partial V}{\partial X}-\Omega_y\frac{\partial V}{\partial Y}-\Omega_z\frac{\partial V}{\partial Z}=\sqrt{\frac{Pr}{Ra}}\nabla^2\Omega_y-\frac{\partial \Theta}{\partial X}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \Omega_z}{\partial \tau}+U\frac{\partial \Omega_z}{\partial X}+V\frac{\partial \Omega_z}{\partial Y}+W\frac{\partial \Omega_z}{\partial Z}-\Omega_x\frac{\partial W}{\partial X}-\Omega_y\frac{\partial W}{\partial Y}-\Omega_z\frac{\partial W}{\partial Z}=\sqrt{\frac{Pr}{Ra}}\nabla^2\Omega_z, \quad (3)$$

$$\nabla^2\Psi_x=-\Omega_x,\ \ \nabla^2\Psi_y=-\Omega_y,\ \ \nabla^2\Psi_z=-\Omega_z, \quad (4)$$

$$\frac{\partial \Theta}{\partial \tau}+U\frac{\partial \Theta}{\partial X}+V\frac{\partial \Theta}{\partial Y}+W\frac{\partial \Theta}{\partial Z}=\frac{1}{\sqrt{Ra\cdot Pr}}\nabla^2\Theta \quad (5)$$

Начальные и граничные условия для приведенной задачи (1)-(5) были представлены в виде:

$\tau=0$: $\Psi_x=\Psi_y=\Psi_z=\Omega_x=\Omega_y=\Omega_z=0,\ \Theta=0.5;$

$\tau>0$: $\dfrac{\partial \Psi_x}{\partial X}=\Psi_y=\Psi_z=0,\ \Omega_x=0,\ \Omega_y=-\dfrac{\partial^2\Psi_y}{\partial X^2},\ \Omega_z=-\dfrac{\partial^2\Psi_z}{\partial X^2},\ \Theta=0$ при $X=0,\ X=1;$

$\Psi_x=\dfrac{\partial \Psi_y}{\partial Y}=\Psi_z=0,\ \Omega_x=-\dfrac{\partial^2\Psi_x}{\partial Y^2},\ \Omega_y=0,\ \Omega_z=-\dfrac{\partial^2\Psi_z}{\partial Y^2},\ \dfrac{\partial \Theta}{\partial Y}=0$ при $Y=0,\ Y=1;$

$\Psi_x=\Psi_y=\dfrac{\partial \Psi_z}{\partial Z}=0,\ \Omega_x=-\dfrac{\partial^2\Psi_x}{\partial Z^2},\ \Omega_y=-\dfrac{\partial^2\Psi_y}{\partial Z^2},\ \Omega_z=0,\ \dfrac{\partial \Theta}{\partial Z}=0$ при $Z=0,\ Z=1;$

$\Theta=1$ на поверхности источника тепловыделения.

Поставленная краевая задача (1)–(5) была решена на основе метода конечных разностей [6] с использованием локально-одномерной схемы Самарского, для упрощения процесса решения пространственной задачи, и с дальнейшим применение монотонной аппроксимации Самарского и центральных разностей – для дискретизации конвективных и диффузионных слагаемых в имеющихся дифференциальных уравнений в частных производных.

Результаты. Численное моделирование представленной задачи проводилось на равномерной сетке при изменении определяющих параметров – числа Рэлея ($10^4 \le Ra \le 10^6$) и соотношения объема

локального источника тепловыделения к объему рассматриваемой полости. Были подробно проанализированы результаты, описывающие особенности эволюции тепловых факелов и *y*-компоненты векторного потенциала.

На рисунке 2 представлены поля температур и вертикальной компоненты скорости для различных размеров трапециевидного источника. Видно, что размеры нагревателя оказывают существенное влияние на характер теплового режима и гидродинамики внутри области.

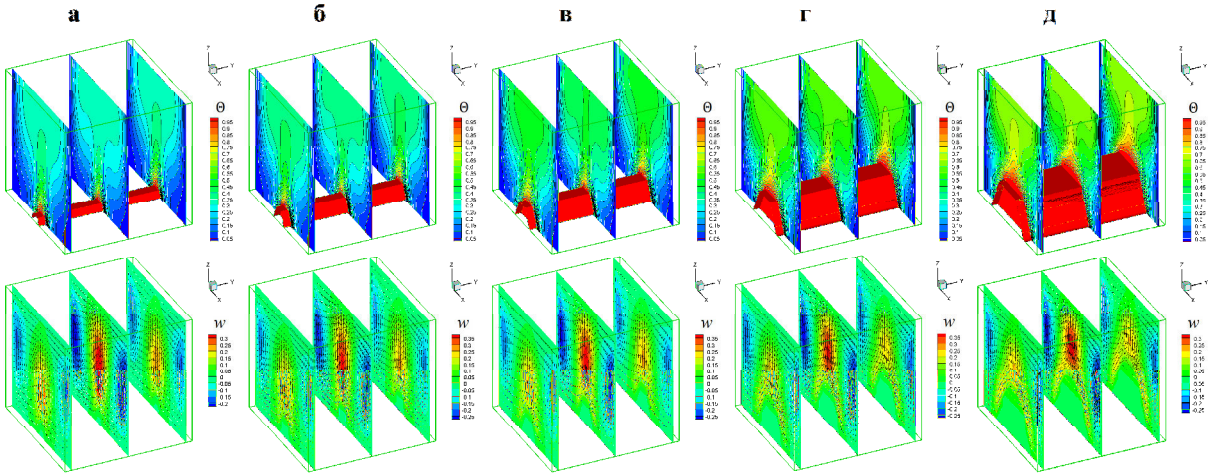


Рис. 2. Трехмерные распределения изолиний температуры (сверху) и w-компоненты скорости (снизу) для следующих соотношений объемов источника и области v/V: а – 0.01, б – 0.02, в – 0.034, г – 0.076, д – 0.135 при Ra=10^5

Работа выполнена в рамках реализации государственного задания Минобрнауки России (проект № 13.9724.2017/БЧ).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Jaluria Y. Design and Optimization of Thermal Systems. – New York: McGraw-Hill, 1998. – 626 p.
2. Шеремет М.А. Сопряженные задачи естественной конвекции. Замкнутые области с локальными источниками тепловыделения. – Берлин: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2011. – 176 с.
3. Гибанов Н.С. Шеремет М.А. Влияние формы и размеров локального источника энергии на режимы конвективного теплопереноса в квадратной полости // Компьютерные исследования и моделирование. 2015. Т. 7. № 2. С. 271–280.
4. Мартюшев С.Г., Шеремет М.А. Численный анализ конвективно-радиационного теплопереноса в замкнутой воздушной полости с локальным источником энергии // Компьютерные исследования и моделирование. – 2014. – Т. 6, № 3. – С. 383–396.
5. Шеремет М.А. Математическое моделирование нестационарной сопряженной термогравитационной конвекции в замкнутом наклонном цилиндре // Механика жидкости и газа. Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского, 2011, №4, с. 1272-1274
6. Полежаев В.И. и др. Математическое моделирование конвективного теплообмена на основе уравнений Навье-Стокса. М.: Наука, 1987. – 271 с.

НАНОСТРУКТУРНАЯ КЕРАМИКА НА ОСНОВЕ ZrO_2, ПОЛУЧЕННАЯ ПО АДДИТИВНОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Н.В Грунт[1], Н.А. Шульц[1], В.В. Промахов[1,2]

Научные руководители: д.ф.-м.н. А.Б. Ворожцов, д.ф.-м.н. А.С. Жуков

[1]Национальный исследовательский Томский государственный университет,

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

[2]Институт проблем химико-энергетических технологий СО РАН,

Россия, г. Бийск, ул. Социалистическая, 1, 659322

E-mail: vvpromakhov@mail.ru

NANOSTRUCTURED CERAMICS BASED ON ZrO_2, OBTAINED BY ADDITIVE TECHNOLOGY

N.V. Grunt[1], N.A. Shults[1], V.V. Promakhov[1,2]

Scientific Supervisors: Dr. A.B. Vorozhtsov, Dr. A.S. Zhukov

[1]Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050

[2]Institute for Problems of Chemical & Energetic Technologies SB RAS, Russia, Altai region,

Biysk, Socialisticheskaya str., 1, 659322

E-mail: vvpromakhov@mail.ru

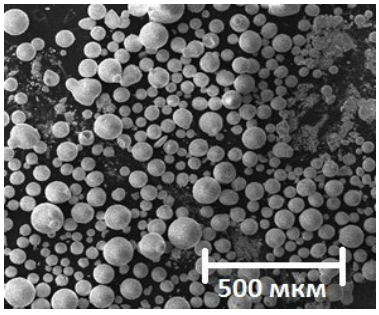
Abstract. *The aim of this work was to study nanostructured powders based on ZrO_2 and analyzing the properties of thermoplastic pastes for 3D printing of experimental samples. Data on structure and properties of the nanopowders were obtained. Using the method of Fusing Deposition Modeling were obtained ceramic samples.*

Введение. Опираясь на мировой опыт в развитии современных подходов физического материаловедения и новых технических решений необходимо признать, что изготовление узлов и отдельных деталей из новых конструкционных и функциональных материалов без развития аддитивных технологий осуществить невозможно. Аддитивные технологии, прежде всего, позволяют с минимальными затратами реализовать любые конструкторские и инженерные идеи в наукоемких отраслях производства, таких как авиастроение, двигателестроение, ракетостроение, современные электронные приборы и др. [1].

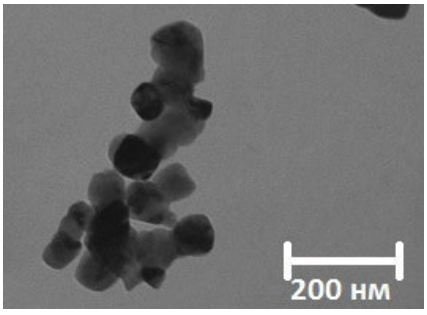
С использованием методов селективного лазерного спекания к настоящему времени проведены исследования по формованию изделий, в том числе и из керамических порошков [2]. Однако механизмы структурообразования, которые определяются диффузионными процессами, не реализуются в случае кратковременного воздействия на порошки лазерным лучом. Вследствие этого, структура керамики неоднородна – присутствуют большое количество пор и трещин. Относительная плотность образцов составляет 57-77% в зависимости от мощности лазера. Это недопустимо в изделиях конструкционного и функционального назначения, что позволяет сделать вывод о неприменимость лазерного спекания керамических порошков. Большое количество работ посвящается альтернативным (гибридным) подходам по формированию «качественной» структуры керамических изделий [3]. Это обусловливает актуальность настоящей работы.

Экспериментальная часть. К настоящему времени специалистами Томского государственного университета был разработан оригинальный метод аддитивной печати сложнопрофильных изделий, основанный на принципах послойного наплавления FDM (Fusing Deposition Modeling) термопластичных дисперсных систем, представляющих собой смесь порошка материала и термопластичного вещества (технологической связки) [4]. Создан 3D принтер, адаптированный к работе с термопластичными пастами (суспензиями) на основе керамических порошков. Общий процесс включает в себя подготовку сырья, нанесение материала через сопло (фильеру) и постобработки. Стадия постобработки включает удаление связующего и спекание. Полный технологический цикл отработан на керамических материалах из оксида алюминия. В данном случае был использован шликер марки ВК-95, содержащий 95% оксида алюминия и 5 % кордиерита. В результате синтеза керамики помимо основной фазы корунда формируется фаза муллита, однако её содержание не превышает 1 масс % и не оказывает влияния на физико-механические свойства образцов. Пористость образцов не превышала 5%. Контролируемая усадка при спекании составляла 14-15 % [5,6]. Для расширения номенклатуры материалов, используемых для 3D печати была изучены возможность выращивания образцов из порошков на основе диоксида циркония. Свойства этого материала хорошо изучены и его применение в различных технических устройствах весьма актуально.

Получение образцов проводили с использованием порошков фирмы Tosoh. На рисунке 1 представлены результаты исследования порошков $ZrO_2(3\%Y_2O_3)$ методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ). Видно, что порошки представляют собой гранулят со средним размером гранул 40÷80 мкм, рисунок 1(а). При этом гранулы состоят из наночастиц средним размером около 100 нм, рисунок 1(б). Частицы имеют довольное узкое распределение по размеру.



а)



б)

Рис.1 Изображения нанопорошков системы $ZrO_2(3\%Y_2O_3)$

Удельная поверхность, измеренная по низкотемпературной адсорбции паров азота (метод многоточечного БЭТ) составила 7,83 $м^2/г$. Элементный состав порошков исследовали методом рентгенофлуоресцентной спектроскопии. Установлено, что в порошках содержится Zr – 65%, O – 29%, Y-3%, Hf – 2%. В небольших количествах обнаружены Al – 0.13%, Cl и S – по 0,11%, в также C, Ce, Fe, Si. Фазовый состав порошка представлен фазами ZrO_2. Содержание фаз: тетрагональной – 50%, моноклинной 22%, кубической 28%.

Из порошков были подготовлены термопластичные пасты с различным содержанием связующего. Определены параметры вязкости системы с использованием ротационного вязкозиметра. Установлена

зависимость между содержанием связующего и вязкостью материала, а также зависимость вязкости от температуры в диапазоне 60÷100°С. Выявлено, что при содержании связующего от 28 до 32 масс % в диапазоне температуры 90÷100°С вязкость суспензии не превышала 25 Па·с, что позволяет реализовать процесс печати с использованием FDM способа.

На рисунке 2 представлен экспериментальный образец, полученный методом 3D печати.

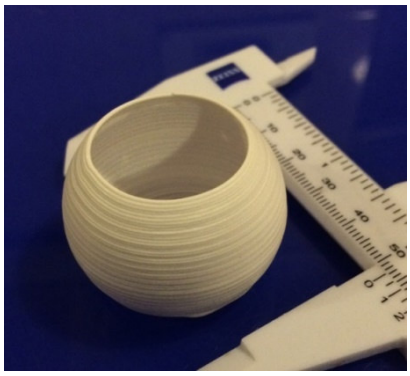


Рис. 2 Изображение экспериментального образца из порошков $ZrO_2(3\%Y_2O_3)$, полученного с использованием 3D печати

Выводы. Таким образом, изучены исходные нанопорошки на основе диоксида циркония, получены термопластичные суспензии, изучены закономерности изменений реологических свойств суспензий в зависимости от температуры. Получены экспериментальные образцы наноструктурной керамики с использованием аддитивной технологии послойного наплавления.

Работа выполнена при финансовой поддержке Гранта Президента МК - 2424.2017.8 договор № 14.Y30.17.2424-МК.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Gao W. et al. The status, challenges, and future of additive manufacturing in engineering //Computer-Aided Design. – 2015. – Т. 69. – С. 65-89.
2. Enrique Juste etc. Shaping of ceramic parts by selective laser melting of powder bed // J. of Mater.Res., Vol.29, 2014, №29, P. 2086-2094
3. Leuven K. U. et al. Additive manufacturing of ceramics: a review //Journal of Ceramic Science and Technology. – 2014. – Т. 5. – №. 4. – С. 245-260.
4. О Возможности получения аддитивных керамических структур с использованием метода послойного наплавления // Промахов В.В., Жуков И.А., Ворожцов С.А., Шевченко М.В., Третьяков Б.Г., Жуков А.С., Ворожцов А.Б. – В сборнике: Аддитивные технологии: настоящее и будущее / материалы II Международной конференции. ФГУП «ВИАМ» ГНЦ РФ. 2016. С.12.
5. Промахов В.В., Жуков И.А., Ворожцов С.А., Шевченко М.В., Платов В.А., Архипов В.А., Муравлев Е.В. Аддитивный способ формирования изделий из порошков тугоплавких соединений // Ползуновский вестник. – 2016 – № 4.– С. 59-63.
6. Promakhov V. et al. On the possibility to fabricate ceramics using fused deposition modeling //AIP Conference Proceedings. – AIP Publishing, 2016. – Т. 1772. – №. 1. – С. 030003.

ВЛИЯНИЯ МОДИФИЦИРОВАНИЯ СТАЛИ 110Г13Л НА СРЕДНИЙ РАЗМЕР ЗЕРЕН И ВКЛЮЧЕНИЙ

Т.В. Дement

Научный руководитель: к.т.н. Н.А. Попова, д.ф-м.н. И.А. Курзина

Томский государственный архитектурно-строительный университет,

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

E-mail: tarasevi416@mail.ru

EFFECT OF MODIFICATION ON STEEL 1,1C-13Mn-Fe ON AVERAGE SIZE OF GRAIN AND INCLUTIONS

T.V. Dement

Scientific Supervisor: PhD N.A. Popova, Doctor of Physico-Mathematical Sciences I.A. Kurzina

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

E-mail: tarasevi416@mail.ru

Abstract. *In this paper, was studied the effect of ultrafine powder TiO_2, ZrO_2, Na_3AlF_6 and cryolite on the microstructure of steel 1,1C-13Mn-Fe. Quantitatively were studied inclusions and grain sizes. The average grain size in the non-modified samples was ~ 120 μm, the average size of inclusions along the grain boundaries ~ 12 μm in grain ~ 11 μm. The average grain size in the modified samples was ~ 99 μm, the average size of inclusions along the grain boundaries ~ 2,6 μm in grain ~ 9,6 μm.*

Введение. Увеличение эксплуатационного периода быстроизнашивающихся деталей машин является одной из главных проблем современного машиностроения. Продление срока службы таких деталей является важной целью в горнорудной, угольной, цементной и других отраслях промышленности, связанных с переработкой высокоабразивного минерального сырья (руды, угля, песка и др.). Период эксплуатации деталей машин и других изделий, их надежность и долговечность во многих случаях обеспечивается высокими показателями износостойкости материалов, из которых они изготовлены [1, 2].

В настоящее время одним из наиболее широко используемых материалов, обладающим высокой изностойкостью, является марганцовистая аустенитная сталь Гадфильда (110Г13Л), служащая для изготовления деталей, износ которых сопровождается ударами, большими давлениями и постоянными нагрузками. Введение модификатора, несомненно, влияет на микроструктуру, фазовый состав, и, как следствие, на свойства стали. Таким образом, детальное изучение стали 110Г13Л до и после модифицирования является актуальной задачей. В работах [3, 4] был исследован фазовый состав материалов. Однако большую роль при модификации физико-механических свойств материалов играет размер и состояние границ зерен, а также распределение неметаллических включений и их размеры. Данные исследования являются актуальными и ранее не проводились.

Целью настоящей работы является выявить влияние модифицирования на границы зерен, зеренное состояние и локализацию неметаллических включений в стали 110Г13Л.

Материал и методы исследования. В качестве модифицирующей смеси (МС) использовали ультрадисперсные порошки TiO_2, ZrO_2 и Na_3AlF_6. Оксидные материалы TiO_2 и ZrO_2 были получены термохимическим методом из растворимых солей редких металлов на производственных мощностях ООО «Лазерхим» (г. Донецк, Украина). В качестве поверхностно-активного вещества использовали криолит технический. Однородная смесь была получена механически смешением компонентов.

Исследованы серии образцов крестовин из высокомарганцевой стали марки 110Г13Л, изготовленных на ОАО «Новосибирском стрелочном заводе» в двух состояниях: 1) немодифицированные образцы, полученные по обычной заводской технологии; 2) модифицированные образцы (после введения ультрадисперсной модифицирующей смеси). Модифицирующая смесь (МС) состояла из ультрадисперсных порошков TiO_2, ZrO_2 (с содержанием примесей Nb, Hf, Mo, Mg, Fe, Cr, Al, Cu не более 5 %) и криолита, средний размер частиц составлял ~1 мкм [3]. Модифицирование высокомарганцевой стали проводили в ковше с добавлением модификатора в количестве 0,4% от массы расплава. Полученные образцы крестовин имели следующий химический состав: 1) исходный: 1,2% C; 14,7% Mn; 0,5% Si; 0,03% P; 0,001% S; 2) модифицированный: 1,2% C; 14,1% Mn; 0,5% Si; 0,03% P; 0,001% S.

Основными методами структурных исследований отливок в работе являлись просвечивающая электронная дифракционная микроскопия (электронный микроскоп *ЭМ-125* при рабочем увеличении 25000 крат) – ПЭМ, и оптическая микроскопия (микроскоп металлографический инвертированный Метам ЛВ– 34, при увеличениях 100, 200, 400 крат).

Результаты и их обсуждение. По изображениям, полученным методом оптической металлографии (рис.1) проанализирован размер зерен до и после введения модифицирующей смеси в расплав.

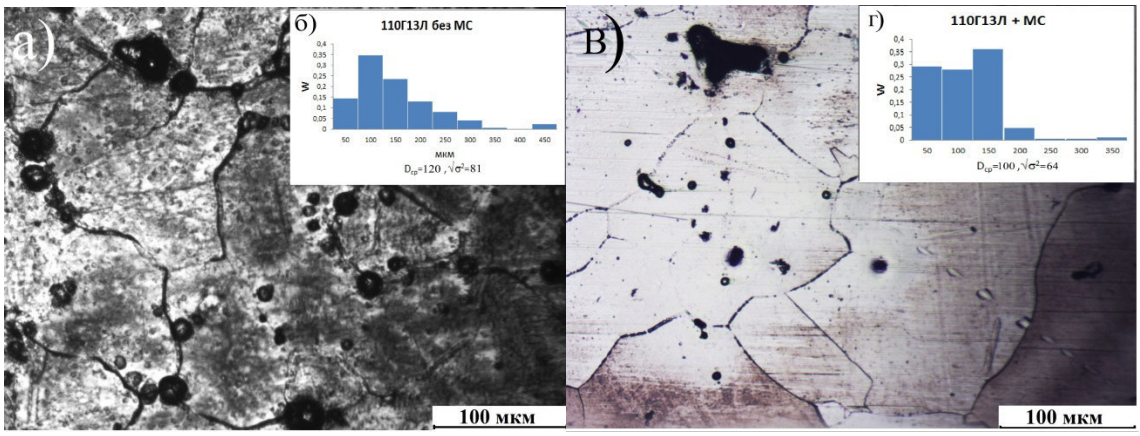


Рис.1. Изображения, полученные методом оптической микроскопии (а, в), и распределения зерен по размерам (б, г) до (а, б) и после (в, г) модификации

Установлено, что размеры основной части зерен в исходном (до модификации) состоянии находятся в диапазоне от ~50 мкм до ~450 мкм, при этом основную фракцию представляют зерна с размером от ~50 мкм до ~100 мкм (~35%), средний размер зерен составляет ~120 мкм (рис.1*б*). После модификации размеры основной части зерен находятся в диапазоне от ~50 мкм до ~350 мкм, при этом основную фракцию представляют зерна с размером от ~100 мкм до ~150 мкм (~36%), средний размер

зерен составляет ~99 мкм (рис.1*г*). Таким образом, введение модификатора повлияло на размер зерен, а именно, основная часть зерен (более 90%) имеет меньшие размеры по сравнению с немодифицированным образцом (меньше 150 мкм). Это подтверждается распределениями зерен по размерам, представленными на рис. 1*б* и рис. 1*г*.

На рис. 1*а,в* видно, что по всему объему как исходного образца, так и модифицированного присутствуют неметаллические включения вторичных фаз. Проведенные измерения показали, что в исходном образце на границах зерен находятся в основном крупные неметаллические включения, в теле зерен локализуются более мелкие включения. Средний размер включений по границам зерен составляет ~12 мкм, средний размер включений внутри зерен составляет ~11 мкм. Это хорошо видно на изображениях и подтверждается распределениями, представленными на рис.2*а-б*.

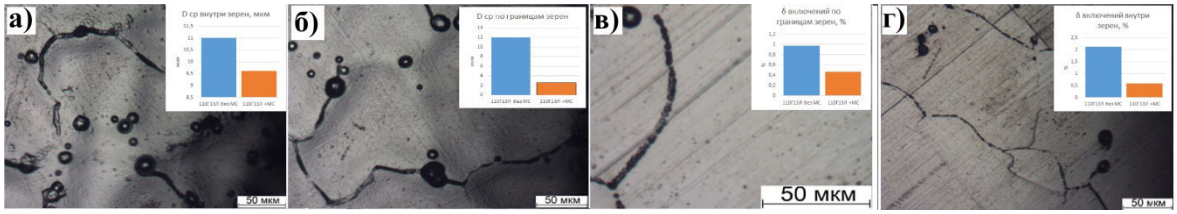


Рис. 2. *Изображения, полученные методом оптической микроскопии, и распределения включений по размерам до и после модификации*

После модификации по всему объему образца также присутствуют неметаллические включения (рис. 1*в*). Однако обнаружено, что по границам зерен локализуются мелкие включения, средний размер которых составляет ~2,6 мкм. Крупные неметаллические включения находятся теперь в теле зерен. Средний размер крупных включений составляет ~9,6 мкм. Подтверждением этому служит рис.2 *в-г*. Введение модифицирующей смеси существенно повлияло на размеры неметаллических включений, размер которых уменьшился более чем в 4 раза по границам зерен, но при этом увеличилось их количество.

Заключение. Проведенные исследования методом оптической микроскопии показали, что модификатор повлиял на локализацию, размеры и объемную долю неметаллических включений, а именно:

1) средний размер включений по границам зерен уменьшился более чем в 4 раза, объемная доля уменьшилась в 2 раза;
2) включения равномерно локализовались по границам зерен;
3) средний размер включений внутри зерен практически не уменьшился, при этом объемная доля уменьшилась в 4 раза.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Богачев И.Н., Еголаев В.Ф. Структура и свойства железомарганцевых сплавов. – М.: Металлургия, 1973. – 295с.
2. Цуркан Д.А., Корзунин Ю.К., Расщупкин В.И. Повышение эксплуатационной надёжности машин. // Омский научный вестник. – 2010. – №2. – С. 113-115.
3. Zykova A.P., Kurzina I.A., Novomejsky M.Y. et al. Morphology and Topology of Coherent Scattering Regions of the Fe-Mn-C Steel Fine Structure // Adv. Mater. Res. – 2015. – V. 1085. – P.84-90.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОПТИМАЛЬНОЙ КОМПОНОВКИ АКТИВНОЙ ЗОНЫ РЕАКТОРА ИРТ-Т ДЛЯ ДОСТИЖЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОГО ОБЛУЧЕНИЯ СЛИТКОВ КРЕМНИЯ БОЛЬШОГО ДИАМЕТРА

С.К. Дмитриев, И.И. Лебедев, М.Н. Аникин
Научный руководитель: к.ф.-м.н. А.Г. Наймушин
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050
E-mail: skd1@tpu.ru

DETERMINATION OF THE OPTIMAL CONFIGURATION OF THE IRT-T CORE TO ACHIEVE EFFECTIVE DOPING OF LARGE DIAMETER SILICON INGOTS

S.K. Dmitriev, I.I. Lebedev, M.N. Anikin
Scientific Supervisor: PhD A.G. Naymushin
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050
E-mail: skd1@tpu.ru

Abstract. *In this paper, we examined the main trends in world demand for semiconductor materials. Taking into account the considered trends, at the initial stage a model of a new experimental irradiation volume was constructed, which will allow to obtain ingots of a semiconductor material up to 200 mm in size with high doping accuracy. The next step was to determine the regularities of the FA location in the core, in order to obtain the conditions for the maximum effective flow of NTD in the new experimental channel. In addition, an assessment was made of the influence of regulatory authorities on the course of NTD.*

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. Этот материал является принципиально важным для силовой электроники.

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.

1 Нейтронное трансмутационное легирование кремния. Среди всех существующих методов имплантации примесей наиболее высокая однородность электрофизических параметров кремния достигается при использовании технологии нейтронного трансмутационного легирования (НТЛ). Поэтому

кремний, легированный по этой технологии, широко используется в мировой практике для создания приборов с минимальным разбросом удельного электрического сопротивления: тиристоры, приборы с зарядовой связью, детекторы излучений, фотоприемники[1].

Создание технологии НТЛ кремния с заданными свойствами – это сложная комплексная задача. Для её решения необходимо выполнить следующие условия:

– обеспечить высокую однородность флюенса нейтронов в любой точке облучаемого слитка, при этом пространственная однородность флюенса нейтронов должна быть выше, чем однородность распределения доноров, атомов P^{31} в кремнии;

– оптимизировать нейтронно-физические параметры зоны облучения для получения термализованного спектра нейтронов, так как концентрация и свойства радиационных дефектов зависят в большой степени от условий облучения (флюенса нейтронов, температуры облучения, а также в большей мере от соотношения плотности потока тепловых и быстрых нейтронов)[2].

2 Проектирование нового экспериментального канала. Технология НТЛ является самой эффективной для объёмных монокристаллов крупного диаметра из-за большой длины пробега нейтронов в кремнии. В связи с возросшим спросом на слитки кремния большего диаметра, который имеет большое значение в силовой и микроэлектронике, появилась необходимость создания новой установки, увеличения объёмов выпускаемой продукции, а также повышения её качества.

Новый облучательный объём должен обеспечивать низкую жесткость спектра, помимо этого должен позволять облучать слитки кремния больших размеров до 200мм, при этом без ухудшения характеристик получаемого продукта. При анализе активной зоны реактора ИРТ-Т для выбора местоположения нового облучательного объёма, была выявлена свободная область в бассейне реактора около стержня автоматического регулирования, в которой имеется возможность разместить экспериментальный канал без нарушения работы ядерного реактора.

В качестве расчётной модели для программы MCU была выбрана полномасштабная модель ядерного реактора ИРТ-Т с последующей модернизацией[3]. На первом этапе расчёта в качестве нового облучательного объёма была выбрана графитовая призма, которая представлена на рисунке 1, а соприкасающаяся грань экспериментальной призмы была разбита на ряд регистрируемых зон, что наглядно видно на рисунке 2.

Рис. 1 – Построение нового облучательного объёма в активной зоне реактора ИРТ-Т

Рис. 2 – Расположение регистрационных зон на экспериментальном канале

Первоначальная задача, определения оптимальных параметров активной зоны заключалась в определении компоновки, которая бы соответствовала эффективному протеканию НТЛ. Для решения поставленной задачи была выбрана кампания ядерного реактора с компоновкой активной зоны за 2016 год,

которая представлена на рисунке 3. Во время моделирования работы ядерного реактора, были рассмотрены различные варианты компоновки активной зоны. При расчёте аксиального коэффициента неравномерности в настоящей работе рассматривались регистрационные зоны 3-2 – 8-3, поскольку именно в этой области призмы будет находиться экспериментальный канал.

Результаты расчёта показали, что наибольшая эффективность протекания НТЛ достигается в том случае, когда свежее топливо располагается ближе к экспериментальному объёму. Причем, наибольшая плотность потока тепловых нейтронов на рассматриваемой поверхности достигается в случае, когда ТВС с наименьшим выгоранием находятся у экспериментального объёма в центральной части, а если более свежие ТВС расположить по краям – достигается меньшая неравномерность.

Полученные результаты показали, что значение плотности потока тепловых нейтронов через поверхность экспериментального объёма очень сильно зависит от компоновки активной зоны. При этом значение плотности потока тепловых нейтронов в крайних случаях может разниться до 40 %.

Плотность потока тепловых нейтронов			
6,44E+12	8,63E+12	9,36E+12	7,10E+12
1,43E+13	1,98E+13	2,02E+13	1,55E+13
2,47E+13	3,43E+13	3,53E+13	2,75E+13
3,28E+13	4,63E+13	4,80E+13	3,76E+13
3,66E+13	5,36E+13	5,62E+13	4,57E+13
3,70E+13	5,25E+13	5,81E+13	4,83E+13
3,12E+13	4,42E+13	4,83E+13	4,14E+13
2,03E+13	2,86E+13	3,12E+13	2,61E+13

Рис.3– Результаты расчёта первоначальной загрузки активной зоны
$k_{eff} = 1,0264$; $k_z = 1,2997$

Заключение. Во время выполнения работы была построена модель нового экспериментального облучательного объёма, который позволит получать слитки полупроводникового материала размером до 200 мм с высокой точностью легирования. Также, был определен ряд определение закономерностей расположения ТВС в активной зоне, для получения условий максимально эффективного протекания НТЛ в новом экспериментальном канале. Расчёт показал, что только перестановкой ТВС можно повысить производительность до 40 %, при этом сохраняя однородность легирования при аксиальном коэффициенте неравномерности до 1,27.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. 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 сибири. – 2016. – с 113.
2. Бохан П. А. и др. Оптическое и лазерно-химическое разделение изотопов в атомарных парах //М.: Физматлит. – 2010
3. Емец Е. Г. Оптимизация условий облучения и разработка установки для ядерного легирования кремния в реакторе ИРТ-Т: диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук: спец. 05.09. 02 : дис. – 2015Фамилия И.О. Название статьи // Журнал. – 2012. – Т. 1. – № 11. – С. 71–77.

ЭНЕРГОЭФФЕКТИВНАЯ ПЛАЗМЕННАЯ ОБРАБОТКА ПРОМЫШЛЕННЫХ ОТХОДОВ

С В. Егоров, А.А. Каренгин

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

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: kazus@sibmail.com

ENERGY EFFICIENT PLASMA PROCESSING OF INDUSTRIAL WASTES

S.V. Egorov, A.A. Karengin

Scientific Supervisor: Ass. Prof., PhD A.G. Karengin

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

E-mail: kazus@sibmail.com

Abstract. *The paper presents the results of thermodynamic modeling of the process of joint plasma treatment of non-combustible and combustible industrial wastes. The compositions of water-salt-organic compositions based on these wastes and regimes providing their energy-efficient joint treatment in air plasma have been determined.*

Введение. Отходы производства являются мощным фактором, воздействующим на окружающую среду и отрицательно влияющим на качество жизни человека. Их использование в качестве вторичных материальных ресурсов решает ряд важных хозяйственных задач: экономия основного сырья, предотвращение загрязнения водоемов, почвы и воздушного бассейна, производство товаров народного потребления. Так на Томском подземном водозаборе после очистки пресной воды ежегодно образуются около 600 т отходов (ОВО), имеющих следующий состав: Fe- 30,3 %; Mn – 4,5 %; Si – 4,0 %, Ca – 1,0 %, H_2O – остальное [1]. Предприятие ООО «Сибметахим» занимает лидирующие позиции в России по производству метанола, годовой выпуск которого достигает 750000 т. При этом образуется около 3500 т горючих отходов производства метанола (ГОПМ), имеющих следующий переменный состав (табл.1).

Таблица 1

Характерный химический состав горючих отходов производства метанола

№ пробы	H_2O, %	CH_4O, %	C_2H_6O, %	C_3H_8O, %	$Q^н_р$, МДж/кг
1	20,0	70,0	5,3	4,7	13,0
2	21,5	69,9	4,7	3,9	12,3
3	22,1	69,7	4,5	3,7	12,1
4	22,6	69,4	4,4	3,6	11,9
5	23,0	69,1	4,3	3,6	11,8
6	23,2	69,0	4,2	3,6	11,7
7	23,6	68,8	4,1	3,5	11,6
8	23,7	67,6	4,4	4,3	11,6
9	26,4	68,2	3,0	2,4	10,5
10	26,7	66,2	3,7	3,4	10,5
11	28,5	65,7	3,1	2,7	9,8
12	30,2	63,6	3,3	2,9	9,3
13	33,0	61,5	3,0	2,5	8,4

Применяемые традиционные термические технологии получения пигментов из ОВО многостадийны, требуют значительных энергозатрат (2-4 МВт·ч/т) и экологически не безопасны [2]. Совместная плазменная обработка этих отходов в виде водно-солеорганических композиций сможет обеспечить не только снижение затрат электрической энергии на их обработку (до 0,1 МВт·ч/т), но и дополнительное получение тепловой энергии для технологических и бытовых нужд (до 2 МВт·ч/т).

Теоретическая часть. Жидкими горючими композициями считают композиции с низшей теплотворной способностью 8,4 МДж/кг и выше [3]:

$$Q_{\text{н}}^{\text{р}} = \frac{(100 - W - A)Q_{\text{н}}^{\text{с}}}{100} - \frac{2,5W}{100},$$

где $Q_{\text{н}}^{\text{с}}$ – низшая теплотворная способность горючего компонента композиции, МДж/кг; W и A – содержание соответственно воды и негорючих минеральных веществ в композиции, %; 2,5 – скрытая теплота испарения воды при 0 °С, МДж/кг.

Более объективным показателем горючести жидких композиций является их адиабатическая температура горения [3]:

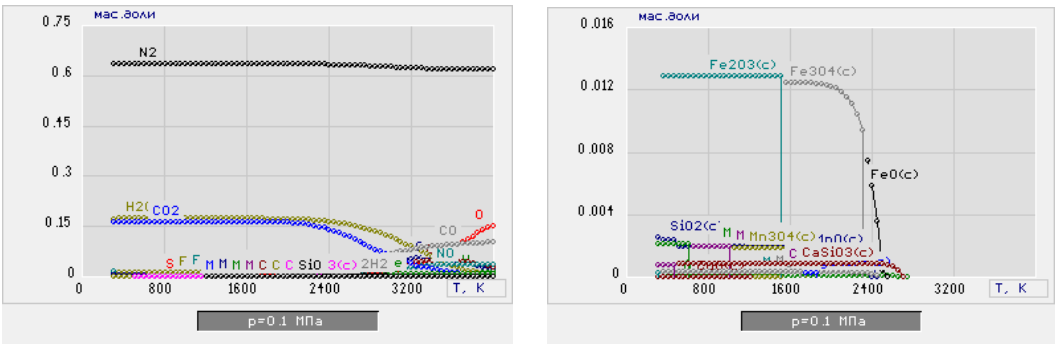
$$T_{ad} = \frac{Q_н^{\,p} + c_{отх} \cdot t_{отх} + \alpha \cdot \upsilon^0_{ок} \cdot c_{ок} \cdot t_{ок}}{\upsilon \cdot c},$$

где $c_{отх}$ – средняя массовая теплоемкость жидкой композиции, кДж/(кг·град); $t_{отх}$ – температура жидкой композиции, °С; α – коэффициент расхода окислителя; $\vartheta^{o}_{ок}$ – теоретический расход окислителя, м^3/м^3; $c_{ок}$ – средняя массовая теплоемкость окислителя, (кДж/м^3/град); $t_{ок}$ – температура окислителя, °С; v и c – соответственно удельный объем и удельная равновесная теплоемкость продуктов плазменной обработки водно-солевых отходов в виде водно-солеорганических композиций, м^3/кг и МДж/(м^3·град).

Из анализа представленных данных (табл. 1) следует, что эти отходы могут быть использованы как для совместной плазменной обработки ОВО и ГОПМ (п.1-п.12), так и для получения тепловой энергии (п.13). В результате проведенных расчетов определены водно-солеорганические композиции (ВСОК) на основе ОВО и ГОПМ, имеющие $Q_{\text{н}}^{\text{р}} \approx$ 8,4 МДж/кг. Например, для п.1 получим композицию ВСОК-1 (17,5 % ОВП : 82,5 % ГОПМ), а для п.12 – композицию ВСОК-12 (4,5 % ОВП : 95,5 % ГОПМ).

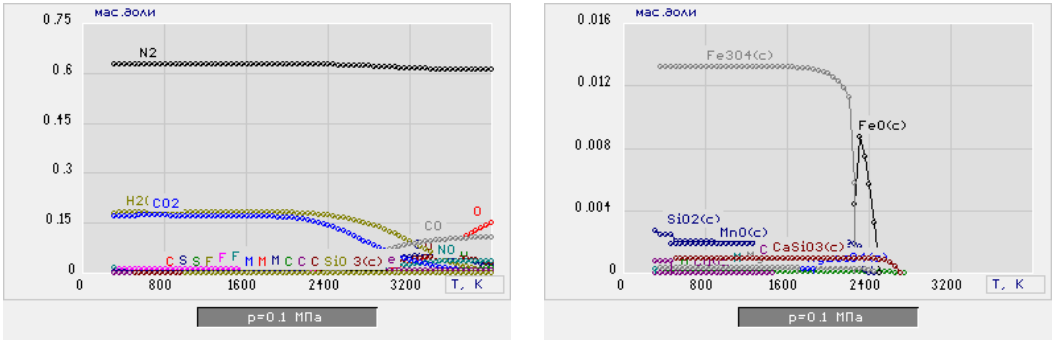
Для определения оптимальных режимов проведены расчёты равновесных составов газообразных и конденсированных продуктов совместной плазменной обработки ОВО и ГОПМ в виде ВСОК в воздушной плазме. Для расчётов использовалась лицензионная программа «TERRA». Расчёты проведены при атмосферном давлении (0,1 МПа), широком диапазоне рабочих температур (300÷4000) К и для различных массовых долей воздушного плазменного теплоносителя (10÷90) %.

На рисунке 1 показано влияние температуры на равновесный состав газообразных (а) и конденсированных (б) продуктов совместной плазменной обработки ОВП и ГОПМ в виде композиции ВСОК-1 при исходной массовой доле воздуха 83 %. Из анализа равновесных составов следует, что при исходной массовой доле воздуха 83 % и температурах до 1600 К основными продуктами в газовой фазе являются N_2, CO_2 и H_2O (рис. 1а), а в конденсированной фазе (рис. 1б) – простые и сложные оксиды металлов, включая немагнитный оксид железа Fe_2O_3(с). Снижение исходной массовой доли воздуха до 82 % (рисунок 2) приводит к образованию в конденсированной фазе магнитного оксида железа Fe_3O_4(с).



а) *б)*

Рис. 1. Влияние температуры на равновесный состав газообразных (а) и конденсированных (б) продуктов плазменной обработки ВСОК-1 в воздушной плазме: (83 % Воздух: 17 % ВСОК-1)



а) *б)*

Рис. 2. Влияние температуры на равновесный состав газообразных (а) и конденсированных (б) продуктов плазменной обработки ВСОК-1 в воздушной плазме: (82 % Воздух: 18 % ВСОК-1)

Наличие магнитного оксида железа в составе твердых продуктов позволит применить магнитное осаждение для их извлечения из водных суспензий при использовании «мокрой» очистки отходящих газов.

Заключение. По результатам проведенных расчетов могут быть рекомендованы для практической реализации совместной плазменной обработки ОВП и ГОПМ в воздушной плазме следующие режимы: состав ВСОК-1 (17,5 % ОВП : 83,5 % ГОПМ); массовая доля воздуха (82 % Воздух :18 % ВСОК-1); температура (1500±100) K.. Результаты проведенных исследований могут быть использованы при создании технологии энергоэффективной совместной плазменной обработки ОВО и ГОПМ в воздушной плазме в виде оптимальных по составу водно-солеорганических композиций.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Лисецкий В. Н., Брюханцев В. Н.,. Андрейченко А. А. Улавливание и утилизация осадков водоподготовки на водозаборах г. Томска. - Томск: Изд-во НТЛ, 2003. – 164 с.
2. Беленький Е. Ф., Рискин И. В. Химия и технология пигментов. – Л.: Ленгосхимиздат, 1949. – 624с.
3. Бернадинер М.Н., Шурыгин А.П.// Огневая переработка и обезвреживание промышленных отходов.// М.: Химия, 1990. – 304 с.

ЗАВИСИМОСТЬ КИНЕТИЧЕСКОЙ ЭНЕРГИИ ЕДИНИЦЫ ДЛИНЫ ДИСЛОКАЦИОННОЙ ПЕТЛИ В ФОРМЕ ОКРУЖНОСТИ ОТ РЕШЕТОЧНОГО И ПРИМЕСНОГО ТРЕНИЯ

А.С. Елисеев

Научный руководитель: доцент, к.ф.-м.н. А.Е. Петелин

Национальный исследовательский Томский государственный университет,

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

E-mail: eliseev-97@yandex.ru

DEPENDENCE OF THE KINETIC ENERGY PER UNIT LENGTH OF THE SHAPE DISLOCATION LOOP FROM THE LATTICE AND IMPURITY SLIDING FRICTION

A.S. Eliseev

Scientific Supervisor: assistant professor, PhD. A.E. Petelin

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

E-mail: eliseev-97@yandex.ru

Abstract. *The paper presents the study on dependence of the kinetic energy per unit length of the dislocation at various values of the lattice and impurity sliding friction in copper and aluminum. The research is conducted with use of mathematical model of dynamics of a dislocation loop in the shape of a circle.*

Введение. Кристаллографическое скольжение – это сложное физическое явление, изучение которого затруднено из-за сильной зависимости процесса от внешних условий и большого количества сил различного характера и происхождения, препятствующих движению дислокаций [1]. В данной работе проведено исследование закономерности изменения кинетической энергии единицы длины дислокационной петли в меди и алюминии.

Методы исследования. Исследование проведено методом математического моделирования с использованием модели расширения дислокационной петли в форме окружности [2]. В [2] учитывается сила Пича-Кёллера и силы сопротивления дислокационному движению, обусловленные решеточным, примесным и дислокационным трением, линейным натяжением, генерацией точечных дефектов за порогами на дислокации, обратными полями напряжений со стороны скопления ранее испущенных дислокаций и вязким торможением. В модели [2] использовано предположение о том, что зона кристаллографического сдвига формируется в однородной изотропной среде; что линейное натяжение одинаково по всей длине петли; что напряжение, связанное с генерацией точечных дефектов на винтовых составляющих дислокационной петли, равномерно распределено по всей длине петли.

Для проведения вычислительных экспериментов использована программа DDCS [3] и её мобильная версия MDDCS [4]. В расчётах использованы следующие значения параметров математической модели [2]: действующее на дислокационный источник напряжение 23 МПа, плотность дислокаций 10^{12} м$^{-2}$, вязкое трение $0{,}49\cdot10^{5}$ Н·с для алюминия и $2{,}1\cdot10^{5}$ Н·с для меди, коэффициент Пуассона 0,34 (алюминий) и 0,35 (медь), модуль сдвига $2{,}6\cdot10^{-10}$ Н/м$^{-2}$ (алюминий) и $5{,}6\cdot10^{-10}$ Н/м$^{-2}$ (медь), модуль вектора Бюргерса $2{,}86\cdot10^{10}$ м (алюминий) и $2{,}56\cdot10^{10}$ м (медь), плотность материала 2700 кг/м^3 (алюминий) и 8935 кг/м^3 (медь).

Результаты. На начальном пробеге дислокационной петли её кинетическая энергия резко возрастает и при напряжении решеточного и примесного трения 2 МПа достигает своего максимального значения на отметке 6–9 мкм (рис. 1). Затем кинетическая энергия петли монотонно убывает до момента остановки дислокации. С увеличением номера дислокации начальный пробег уменьшается, но не столь значительно, как полный пробег дислокации.

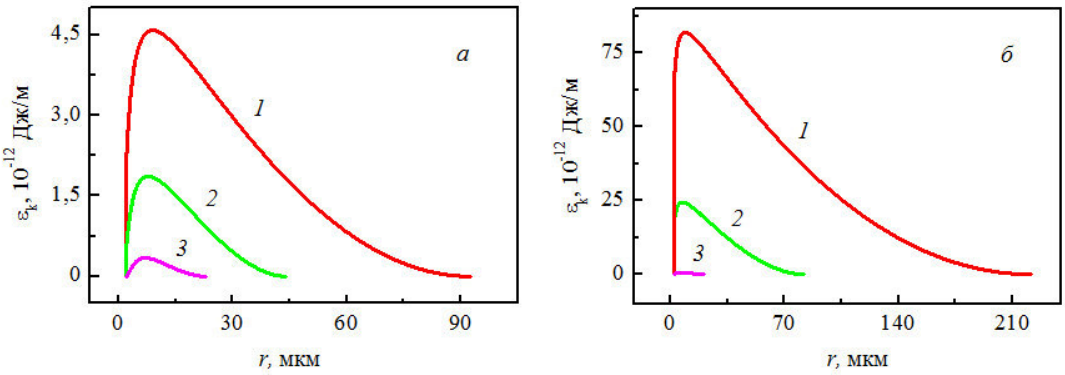


Рис. 1. Зависимость кинетической энергии единицы длины дислокации от текущего пробега для 1-й (кривая 1), средней (2) и последней (3) испущенной дислокационным источником дислокации в меди (а) и алюминии (б). Напряжение решеточного и примесного трения 2 МПа.

В результате проведённых расчётов было показано, что зависимость максимального и среднего значения кинетической энергии единицы длины дислокации от номера дислокации в дислокационном скоплении имеет слабовыраженный гиперболический вид (рис. 2). Для первой дислокационной петли максимальное значение кинетической энергии в алюминии примерно в 17 раз больше, чем в меди. Для последних дислокаций в меди и в алюминии максимальные значения кинетической энергии равны соответственно $4 \cdot 10^{-13}$ Дж/м и $6 \cdot 10^{-13}$ Дж/м. Похожая закономерность наблюдается для среднего значения кинетической энергии единицы длины дислокационной петли.

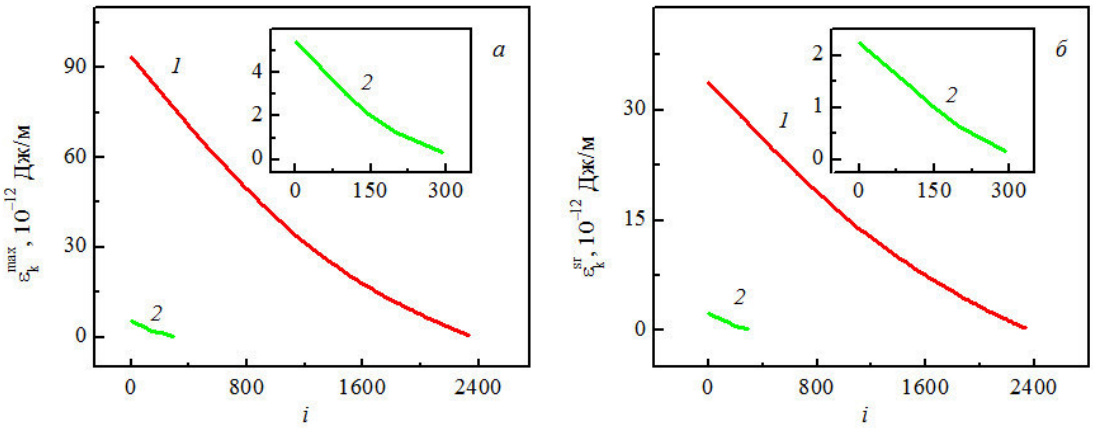


Рис. 2. Зависимость максимального (а) и среднего (б) значения кинетической энергии единицы длины дислокации от номера испущенной дислокационной петли в алюминии (1) и меди (2)

Показано, что в алюминии и меди зависимость максимального и среднего значения кинетической энергии единицы длины дислокационной петли от решеточного и примесного трения линейная обратно

пропорциональная (рис. 3). При увеличении решеточного и примесного трения с 0,1 МПа до 2 МПа максимальная кинетическая энергия уменьшается на 28 % в меди и на 37 % в алюминии, а среднее значение кинетической энергии – примерно на 25 % и 34 % соответственно.

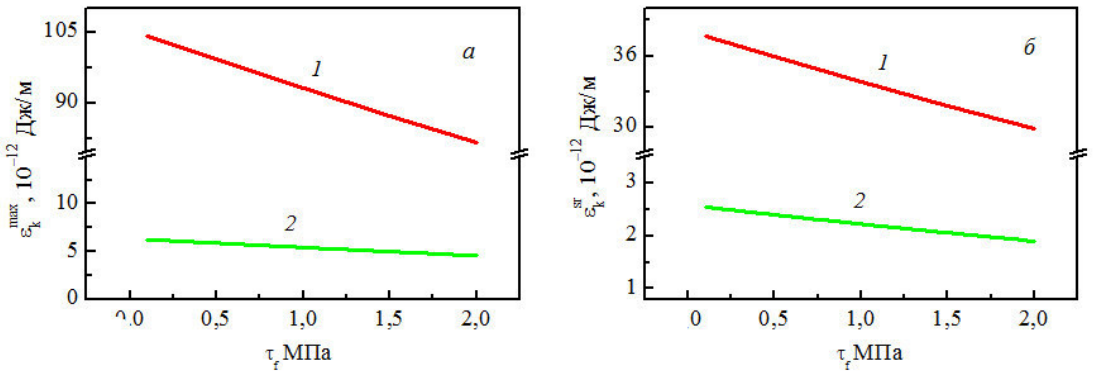


Рис. 3. Зависимость максимального (а) и среднего (б) значения кинетической энергии единицы длины дислокации от решеточного примесного трения в алюминии (1) и меди (2)

Выводы. Таким образом, в результате проведенного исследования показано, что для дислокационной петли, представленной в форме окружности, зависимость ее кинетической энергии от решеточного и примесного трения обратно пропорциональная линейная. При этом изменение значения решеточного и примесного трения на одну и ту же величину приводит примерно к одинаковому изменению максимального и среднего значения кинетической энергии единицы длины дислокации и в меди и в алюминии.

При одинаковом значении решеточного и примесного трения максимальное значение кинетической энергии первой дислокационной петли в алюминии более чем на порядок больше, чем в меди. Для последних дислокаций в меди и в алюминии максимальные значения кинетической энергии отличаются незначительно и близки к нулю.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Слободской М.И. Попов Л.Е. Исследование явления скольжения в кристаллах методами имитационного моделирования – Томск: Изд-во Том. гос. архит.-строит. ун-та. – 2004. – 450 с.
2. Петелин А.Е., Колупаева С.Н. Математическое моделирование формирования зоны кристаллографического сдвига в алюминии // Вестник Томского государственного архитектурно-строительного университета. – 2010. – № 3. – С. 175–181.
3. Самохина С.И., Петелин А.Е. Разработка программного комплекса для моделирования зоны сдвига в ГЦК-металлах // Новые информационные технологии в исследовании сложных структур: доклады VI Всероссийской конференции с международным участием. Сер. «Вестник Томского государственного университета». – 2006. – С. 141–145.
4. Петелин А.Е., Кирилюк В.А., Куклин Е.В., Заводовский Н.А. Разработка мобильного приложения для моделирования динамики дислокационной петли в ГЦК-металлах // Научный альманах. – 2016. – № 6-2 (19). – С. 276-278.

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОЛИТНО-ПЛАЗМЕННОГО АЗОТИРОВАНИЯ НА ФАЗОВЫЙ СОСТАВ ПЕРЛИТНОЙ СТАЛИ

Л.А. Ерыгина[1], Н.А. Попова[2], Е.Л. Никоненко[2,3], М.К. Скаков[1]

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. М.К. Скаков[1]

[1]Национальный ядерный центр Республики Казахстан,

г. Курчатов, Казахстан, ул. Красноармейская, 2, 071100

[2]Томский государственный архитектурно-строительный университет,

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

[3]Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: lyuda.mila@mail.ru

PHASE COMPOSITION OF PERLITE STEEL MODIFIED BY ELECTROLYTIC PLASMA NITRIDING

L.A. Erygina[1], N.A. Popova[2], E.L. Nikonenko[2,3], M.K. Skakov[1]

Scientific Supervisor: Prof. Dr. M.K. Skakov[1]

[1]National Nuclear Center of the Republic of Kazakhstan,

Kurchatov, Kazakhstan, Krasnoarmeiskaya str., 2, 071100

[2]Tomsk State University of Architecture and Building, Tomsk, Russia 2, Solyanaya sq., 2, 634003

[3]National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia, Lenin ave., 3, 0634050,

E-mail: lyuda.mila@mail.ru

Abstract. *The paper presents the transmission electron microscopy investigations of the phase composition of the type 34X1M steel modified by electrolytic plasma nitriding. It is shown that nitriding results in significant modifications of the steel structure, namely the phase composition and observed phases, including their morphology.*

Введение. Наряду с традиционными методами химико-термической обработки применяются новые методы улучшения эксплуатационных свойств материалов. Одним из таких методов является электролитно-плазменная обработка. Воздействие электролитической плазмой, при котором происходит насыщение поверхности различными химическими элементами, сопровождается формированием поверхности со специфической морфологией. Изменяя состав электролита, можно проводить обработку поверхности с большими скоростями, значительно превышающими характерные скорости термических газофазных и электролитических процессов.

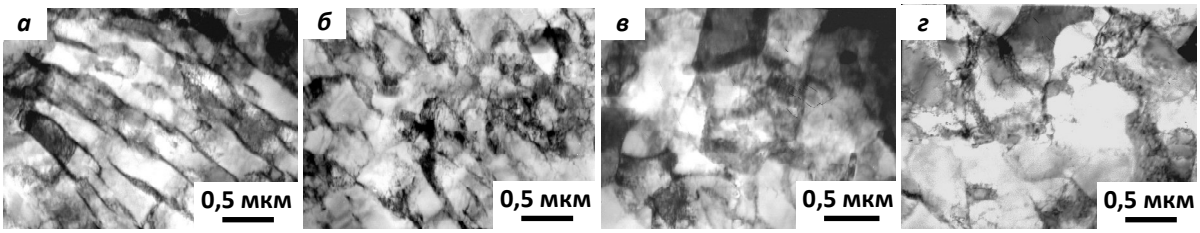
Целью настоящей работы является исследование закономерностей изменения структуры и фазового состава стали 34ХН1М под действием электролитно-плазменного азотирования.

Материал и методы исследования. Объектом исследования являлась сталь 34ХН1М. Химический состав исследуемой стали (0,34% C; 1,34% Cr; 0,67% Mn; 0,36% Si; 1,62% Ni; 0,24% Mo; 0,028% P; 0,033% S; остальное Fe) соответствовал ТУ 24-1-12-179-75.

Исследовалось структурное состояние материала методом просвечивающей дифракционной электронной микроскопии. Изучение образцов проводилось в двух состояниях: 1) до модификации (исходное состояние) и 2) после азотирования. Электролитно-плазменная обработка проводилась азотированием в азотосодержащем водном растворе в течение 5 минут при температуре 600 °С. Исследования выполнены на тонких фольгах с помощью электронного микроскопа ЭМ-125 при ускоряющем напряжении 125 кВ. Рабочее увеличение в колонне микроскопа выбиралось равным от 8000 до 50000 крат.

Полученные результаты. Было установлено, что в *исходном состоянии* структура стали представляет: пластинчатый перлит, феррито-карбидную смесь и фрагментированный феррит.

Пластинчатый перлит присутствует в виде практически идеального (рис.1*а*) и фрагментированного (рис.1*б*). Идеальный (или практически идеальный) пластинчатый перлит представляет собой чередующиеся параллельные пластины α-фазы (феррита) и цементита, расположенные на кратных расстояниях друг от друга. Фрагментированный перлит (или первично фрагментированный перлит) представляет собой структуру, в которой перлитные колонии в основном сохраняются. Объемная доля перлита составляет 35% (идеального – 10%, фрагментированного – 25%).



Электронно-микроскопическое изображение тонкой структуры стали 34ХН1М в исходном состоянии: пластинчатый перлит (а), фрагментированный пластинчатый перлит (б), феррито-карбидная смесь (в), фрагментированный феррит (г)

Феррито-карбидная смесь (рис.1*в*) фактически представляет собой вторично фрагментированный перлит, т.е. разрушенные перлитные колонии. Образуются изотропные фрагменты α-фазы, границы которых частично окаймлены цементитом. Цементит располагается не только по границам фрагментов, но и в их стыках. Поэтому такие участки структуры материала фактически представляют собой смесь зерен α-фазы и цементита и их следует называть «феррито-карбидной смесью». Объемная доля этой морфологической структуры в материале составляет ~45%.

Фрагментированный феррит представляет собой изотропные фрагменты α-фазы (рис.1г). Ни по границам фрагментов, ни в их стыках цементит не обнаруживается. Тем не менее, направленность фрагментов α-фазы сохраняется по типу перлитных колоний. Объемная доля этой структуры составляет в материале 20%.

Азотирование образца привело к тому, что морфология тонкой структуры представлена теперь пластинчатым нефрагментированным перлитом (45%) и фрагментированным ферритом (55%).

Детальное исследование структуры пластинчатого нефрагментированного перлита показало, что он находится после азотирования в трех состояниях. Первое состояние (15%) – практически идеальный пластинчатый перлит (рис.2*а*). Второе состояние (10%) – пластинчатый перлит с разрушенными

пластинами цементита (рис.2*б*). И третье состояние (20%) – дефектный пластинчатый перлит (рис.2*в*). Дифракционный анализ показал, что во всех состояниях кроме легированного цементита M_3C присутствуют частицы фазы Fe_3Mo_3N. Отличие состоит лишь в том, что в первом и втором состояниях частицы фазы Fe_3Mo_3N присутствуют в α-фазе на дислокациях, образуя крапчатый контраст, а в третьем состоянии они находятся внутри пластин цементита. Частицы, расположенные на дислокациях, обладают округлой формой. Средний размер частиц в обоих состояниях одинаков и равен 12 нм. Объемная доля их в α-фазе в каждой составляющей имеет величину ~1%. Частицы фазы Fe_3Mo_3N, расположенные внутри пластин цементита, также обладают округлой формой, но средний размер их крупнее (25 нм). Объемная доля их внутри пластин цементита третьей составляющей нефрагментированного перлита составляет 3%.

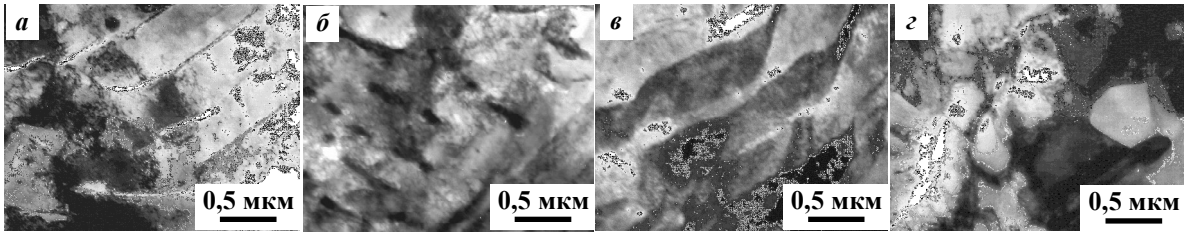


Рис.2. Электронно-микроскопическое изображение тонкой структуры стали 34ХН1М после азотирования: а – практически идеальный пластинчатый перлит (первое состояние нефрагментированного перлита), б – пластинчатый перлит с разрушенными пластинами цементита (второе состояние нефрагментированного перлита), в – дефектный пластинчатый перлит (третье состояние нефрагментированного перлита), г – фрагментированный феррит

Фрагментированный феррит – это вторая составляющая структуры в азотированной стали 34ХН1М (рис.2*г*). Как и исходном состоянии, эта структура представляет собой изотропные фрагменты. Проведенный дифракционный анализ показал, что во фрагментированной структуре феррита присутствуют частицы трех фаз, а именно, нитрида Fe_3Mo_3N, карбонитрида $Cr_2C_{0.61}N_{0.39}$ и легированного цементита M_3C. Частицы нитрида Fe_3Mo_3N обладают округлой формой и расположены внутри фрагментов на дислокациях, а также на границах фрагментов. Средний размер частиц Fe_3Mo_3N, находящихся как внутри, так и на границах фрагментов, составляет 20 нм, объемная доля во фрагментированном феррите также как внутри, так и на границах фрагментов, составляет 1,5%. Частицы карбонитрида $Cr_2C_{0.61}N_{0.39}$ располагаются на границах и в стыках фрагментов, имеют неправильную форму, большой по сравнению с частицами фазы Fe_3Mo_3N размер (<d> = 150 нм). Объемная доля их во фрагментированном феррите составляет 2%.

Заключение. Методом просвечивающей дифракционной электронной микроскопии выполнено исследование фазового состава поверхностного слоя стали 34ХН1М после электролитно-плазменного азотирования. Установлено, что азотирование приводит:

1) к изменению морфологических составляющих матрицы стали,
2) к новому выделению вторичных фаз: карбонитрида $Cr_2C_{0.61}N_{0.39}$ и нитрида Fe_3Mo_3N.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-48-700198.

ДВУСТОРОННИЙ ЭФФЕКТ ПАМЯТИ ФОРМЫ В ДВУХФАЗНЫХ (β+γ) МОНОКРИСТАЛЛАХ СПЛАВА $Co_{38}Ni_{33}Al_{29}$

А.С. Ефтифеева

Научный руководитель: доцент, 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: anna_eftifeeva@rambler.ru

TWO-WAY SHAPE MEMORY EFFECT IN (β+γ) TWO-PHASE $Co_{38}Ni_{33}Al_{29}$ SINGLE CRYSTALS

A.S. Eftifeeva

Scientific Supervisor: Assoc. prof., Dr. E.Yu. Panchenko; Prof., Dr. Yu.I. Chumlyakov

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

E-mail: anna_eftifeeva@rambler.ru

Abstract. *In the present study, it is shown that the aging in martensite under load is the effective way to create two-way shape memory effect at the martensite start temperature M_s=311 K with the reversible strain of 5 % along the $[001]_{B2}$-direction in $Co_{38}Ni_{33}Al_{29}$ single crystals with the minimum volume fraction f_γ~1 % of large γ-phase precipitations. The increase of volume fraction up to f_γ~5 % leads to the suppression of two-way shape memory effect, the reversible strain is less than 1 %.*

Введение. Эффект гигантских магнитоиндуцированных деформаций до 3-10 % исследован на многих системах ферромагнитных сплавов: NiMnGa, NiMnAl, FePd, FePt, CoNiAl, CoNiGa [1]. Одной из основных проблем данного класса материалов является их низкая пластичность. В наиболее перспективных, с точки зрения практического применения, сплавах CoNiAl значительно повысить пластичность возможно за счет выделения частиц низкопрочной γ-фазы [2]. Сплавы CoNiAl испытывают термоупругое мартенситное превращение (МП) из *B2*(β)-аустенита (кубический) в $L1_0$-мартенсит (тетрагональный) в диапазоне температур от 93 К до 393 К в зависимости от химического состава. Частицы γ-фазы не испытывают термоупругое *B2*-$L1_0$ МП [2], поэтому уменьшают объемную долю материала, испытывающего переход и, соответственно, величину обратимой деформации при одностороннем и двустороннем эффекте памяти формы (ЭПФ и ДЭПФ). При ДЭПФ, в отличие от ЭПФ, во время охлаждения/нагрева происходит изменение/восстановление размеров без воздействия внешней нагрузки. В материале с ДЭПФ формируется одновариантная структура мартенсита, которая позволяет легче достичь больших обратимых магнитоиндуцированных деформаций при приложении магнитного поля. Исследования последних двух лет показали, что старение в мартенситном состоянии под нагрузкой является эффективным способом для повышения температур МП [3] и реализации ДЭПФ с высокой циклической стабильностью [4], в отличие от старения в аустенитном состоянии и различного вида «тренировок». Цель данного исследования – изучение влияния старения в мартенситном состоянии под нагрузкой на проявление ЭПФ и ДЭПФ вдоль $[001]_{B2}$-направления в монокристаллах ферромагнитного сплава $Co_{38}Ni_{33}Al_{29}$ с различной объемной долей γ-фазы.

Материалы и методы исследования. Объектом исследования является монокристалл ферромагнитного сплава $Co_{38}Ni_{33}Al_{29}$, выращенный методом Бриджмена. Образцы для исследования при деформации сжатием вдоль $[001]_{B2}$-направления вырезаны из заготовок, предварительно гомогенизированных в течение 8 ч при 1623 К и закаленных в воду комнатной температуры. Форма образцов – параллелепипеды с площадью поперечного сечения S=9 мм^2 и высотой L=6 мм. Закаленные образцы с содержанием различной объемной доли γ-фазы старили в мартенситном состоянии при 398 К в течение 1 ч под сжимающей нагрузкой 430-450 МПа, приложенной перпендикулярно оси деформации образца.

Результаты. Закаленные образцы монокристалла сплава $Co_{38}Ni_{33}Al_{29}$ имеют двухфазную (β+γ)-структуру (рис. 1). Частицы вторичной γ-фазы, наблюдаемые на поверхности образцов, отличаются по размеру и форме: частицы сложной формы имеют размер до 100 мкм и сферической – до 10 мкм. Объемная доля мелких частиц составляет 10 %, в то время как объемная доля крупных частиц f_γ различна в образцах. Оценка показала, что одна партия образцов содержит крупные частицы с f_γ~1 % (кристаллы I) и другая – f_γ~5 % (кристаллы II) (рис. 1 а, б).

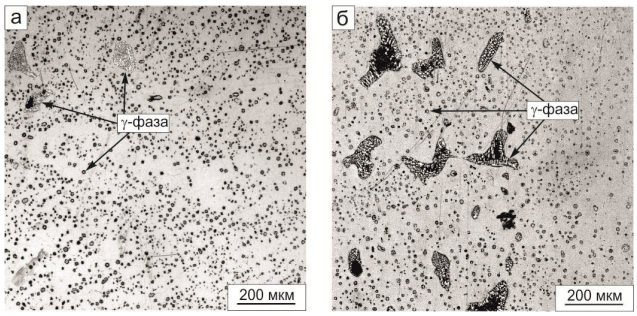


Рис. 1. Оптическая металлография поверхности монокристаллов $Co_{38}Ni_{33}Al_{29}$ после закалки: а – кристаллы I; б – кристаллы II

На рис. 2 представлены результаты исследования развития термоупругих МП при охлаждении/нагреве под действием постоянной сжимающей нагрузки 150 МПа, приложенной вдоль $[001]_{B2}$-направления, в закаленных и состаренных кристаллах. Закаленные кристаллы I и II имеют различные температуры МП и величину ЭПФ. Кристаллы I характеризуются температурой начала прямого МП M_s=251 К и величиной ЭПФ $\varepsilon_{ЭПФ}$=-2,7 % (размер образца уменьшается вдоль $[001]_{B2}$-направления при охлаждении). В кристаллах II с большей объемной долей f_γ~5 ЭПФ реализуется при более высокой температуре M_s=320 К и с меньшей обратимой деформацией $\varepsilon_{ЭПФ}$=-2,0 %, по сравнению с кристаллами I.

Старение приводит к уменьшению температур МП в циклах охлаждение/нагрев под действием сжимающей нагрузки 150 МПа, расширению в 1,4-4,5 раза температурных интервалов превращения $\Delta_1=(M_s-M_f)$ и $\Delta_2=(A_f-A_s)$ по сравнению с закаленным состоянием кристаллов I и II. А именно, после старения величины $\varepsilon_{ЭПФ}$ и M_s для кристаллов I соответственно равны -1,8 % и 227 К. Кристаллы II после старения характеризуются следующими значениями $\varepsilon_{ЭПФ}$=-1,2 % и M_s=265 К.

В закаленном состоянии ДЭПФ не наблюдается без дополнительных тренировок, в то время как в состаренном состоянии тренировки не нужны для наведения ДЭПФ. На рис. 3 показаны результаты исследования ДЭПФ в состаренных в мартенситном состоянии монокристаллах – кривые деформации от температуры ε(T), полученные при охлаждении/нагреве под действием минимальной нагрузки 3 МПа, приложенной вдоль $[001]_{B2}$-направления и необходимой для закрепления образцов в захватах испытательной установки. При ДЭПФ во время охлаждения в свободном состоянии размер образца увеличивается вдоль $[001]_{B2}$-направления, что свидетельствует о наличие внутренних растягивающих

напряжений в состаренном материале. Поэтому при развитии превращения под сжимающей нагрузкой 150 МПа в состаренных образцах (рис. 2), внешние и внутренние напряжения противодействуют друг другу. Это является причиной снижения температур МП и уменьшения обратимой деформации по сравнению с закаленными кристаллами. В состаренных кристаллах I ДЭПФ реализуется с большой величиной обратимой деформации $\varepsilon_{ДЭПФ}$=5 % при высокой температуре M_s=311 K. В состаренных кристаллах II, большая объемная доля f_γ является причиной малой обратимой деформации при ДЭПФ: $\varepsilon_{ДЭПФ}$=0,9 % и M_s=320 K. Это связано с релаксацией внутренних напряжений в материале близи границы β-фазы с крупными частицами γ-фазы в кристаллах с содержанием большой f_γ.

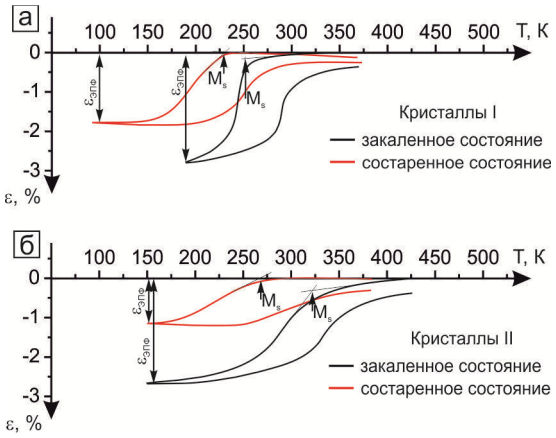


Рис. 2. Кривые ε(T) при $\sigma_{вн}$=150 МПа для монокристаллов $Co_{38}Ni_{33}Al_{29}$: а – кристаллы I; б – кристаллы II

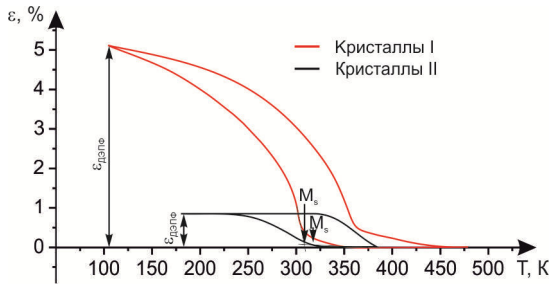


Рис. 3. Кривые ε(T) при $\sigma_{вн}$=3 МПа для монокристаллов $Co_{38}Ni_{33}Al_{29}$ после старения

Заключение. Экспериментально показано, что старение под нагрузкой в мартенситном состоянии является эффективным способом для наведения ДЭПФ при температуре M_s=311 K с величиной обратимой деформации 5 % вдоль $[001]_{B2}$-направления в монокристаллах $Co_{38}Ni_{33}Al_{29}$ с минимальной объемной долей крупных включений γ-фазы f_γ~1 %. Увеличение объемной доли до f_γ~5 % приводит к подавлению ДЭПФ, обратимая деформация становится менее 1 %.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 16-08-00179.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bartova B., Wiese N., Schryvers D., Chapman J.N., Ignacova S. Microstructure of precipitates and magnetic domain structure in an annealed $Co_{38}Ni_{33}Al_{29}$ shape memory alloy // Acta Mater. – 2008. – V. 56. – P. 4470–4476.
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 β+γ two-phase structure // Mater. Sci. Eng., A. – 2006. – V. 438–440. – P. 1054–1060.
3. Niendorf T., Krooβ P., Somsen C., Eggeler G., Chumlyakov Yu.I., Maier H.J. Martensite aging – avenue to new high temperature shape memory alloys // Acta Mater. – 2015. – V. 89. – P. 298–304.
4. Eftifeeva A., Panchenko E., Chumlyakov Yu., Maier H.J. Two-way shape memory effect in $[001]_{B2}$-oriented Co-Ni-Al single crystals // Materials Today: Proceedings. – 2016. – in the press.

АНАЛИЗ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ И РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ СИСТЕМЫ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ СОСТОЯНИЙ ν_6, ν_4, ν_8, ν_7, и ν_{10} ИЗОТОПОЛОГА ЭТИЛЕНА C_2H_3D

С.А. Жданович

Научный руководитель: д.ф.-м.н., профессор Е.С. Бехтерева

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: stas.zhdanovich@hotmail.com

ETHYLENE C_2H_3D ISOTOPOLOGUE: HIGH RESOLUTION STUDY OF ν_6, ν_4, ν_8, ν_7 AND ν_{10} FUNDAMENTALS

S.A. Zhdanovich

Scientific Supervisor: Prof. E.S. Bekhtereva

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

E-mail: stas.zhdanovich@hotmail.com

Abstract. *High Resolution Fourier transform infrared spectra of the C_2H_3D molecule were recorded with Doppler limited resolution in the region of 600 - 1250 cm^{-1} at room temperature. The measurements were carried out under several different absorption conditions using the Bruker 120 HR spectrometer in Braunschweig Technical University. Five fundamentals ν_6, ν_4, ν_8, ν_7, and ν_{10} were observed and found to be perturbed by different resonance interactions. About 6000 lines were assigned in the recorded spectrum. They were used then in the weighted fit procedure with the effective Hamiltonian taking into account five strongly interacting states.*

Введение. Анализ спектров высокого разрешения позволяет определить систему колебательно-вращательных уровней энергий молекулы. Решение обратной спектроскопичекой задачи, в свою очередь, позволяет найти спектроскопические параметры, из которых впоследствии могут быть определены структурные параметры и внутримолекулярное силовое поле (PES-Potential Energy Surface). Знание фундаментальных параметров PES дает представление о процессах, происходящих в молекуле. Моделирование колебательно-вращательных спектров на основе полученных из решений обратной спектроскопической задачи данных также требует знания корректной потенциальной функции исследуемой молекулы. В свою очередь, для того чтобы ее определить из экспериментальных данных, необходимо обладать информацией о как можно большем числе различных изотопических модификаций молекулы. В этой связи, исследование молекулы C_2H_3D представляет большой интерес, с точки зрения определения потенциальной функции молекулы этилена. Банки данных высокого разрешения, повсеместно используется для анализа состава атмосфер планет. Задача дистанционного мониторинга и обнаружения определенных молекул в составе атмосфер планет решается в том числе для поиска землеподобных экзопланет, и/или поиска жизни на них. При этом метан, полимеризующийся в этилен на планетах, имеющих твердую поверхность, служит одним из биомаркеров (сигналов возможного существования форм жизни). [4-6]

Детали эксперимента. Спектр высокого разрешения монодейтерированного этилена был получен на Фурье-спектрометре Brucker 120HR в диапазоне волновых чисел 600 – 1250 см$^{-1}$ (Рис. 1) при комнатной температуре, использовался изотопически чистый образец CH_2=CHD.

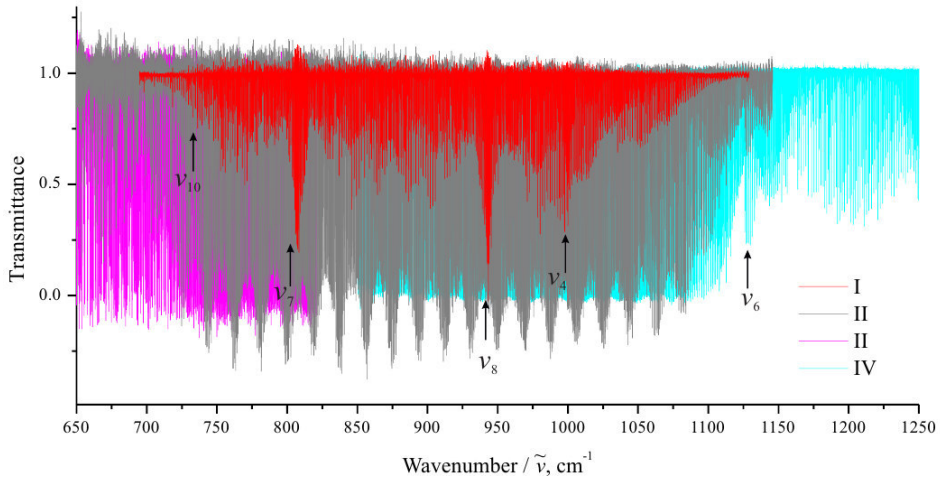


Рис. 1. Обзорный спектр высокого разрешения молекулы C_2H_3D в диапазоне 600 – 1250 см$^{-1}$

Результаты. Набор спектроскопических параметров (Таблица 1) полученный из решения обратной спектроскопической задачи воспроизводит данные исходного эксперимента с точностью до погрешности эксперимента (d_{rms} = 1,5*10^{-4} см$^{-1}$). Результаты анализа спектра приведены в таблице 2.

Таблица 1

Параметры диагонального блока матрицы эффективного гамильтониана молекулы C_2H_3D

Параметр	Основное состояние	(v_{10}=1)	(v_7=1)	(v_8=1)	(v_4=1)	(v_6=1)
E		730,2381189 (321)	806,4678871 (171)	943,5981282 (289)	1000,0379747 (315)	1125,2749524 (242)
A	4,0058896	4,03248514 (214)	4,12725701 (115)	4,09309725 (435)	3,94571062(221)	4,0158546(654)
B	0,9163247	0,91673441 (105)	0,92594582 (605)	0,95447154 (351)	0,9163247(315)	0,9163247(468)
C	0,7437730	0,7405725 (383)	0,7493574(324)	0,7422074(546)	0,74377311(418)	0,74377308(245)
$\Delta_K \times 10^4$	0,7096	0,715841 (245)	0,72071855 (151)	0,697651172 (454)	0,72178511(115)	0,69574212 (487)
$\Delta_{JK} \times 10^5$	0,6023	0,6101542 (452)	0,6023	0,59430413 (441)	0,6110452(368)	0,60045716 (331)
$\Delta_J \times 10^5$	0,12941	0,1328557 (112)	0,1404541(274)	0,1182345(227)	0,13047719(192)	0,1273544(164)
$\delta_K \times 10^5$	0,789	0,789	0,788147(157)	0,790454(884)	0,789	0,77345(229)
$\delta_J \times 10^6$	0,2839	0,2839	0,26170(452)	0,26185(283)	0,2839	0,278431(201)
$H_K \times 10^8$	0,70	0,72061 (323)	0,71844(133)	0,70	0,72617(405)	0,68541(115)
$H_{KJ} \times 10^9$	-0,53	-0,53	-0,53	-0,53	-0,53	-0,53
$H_{JK} \times 10^{10}$	0,58	0,58	0,58	0,58	0,58	0,58
$H_J \times 10^{11}$	0,21	0,21	0,21	0,21	0,21	0,21

Таблица 2

Статистическая информация по проинтерпретированным полосам молекулы C_2H_3D

	(v_{10}=1)	(v_7=1)	(v_8=1)	(v_4=1)	(v_6=1)
$J^{\max} / K_a^{\max}$,[2]$^{a)}$	28/14	35/14	35/14	35/14	30/13
$J^{\max} / K_a^{\max}$,t$\omega^{b)}$	35/18	42/18	45/21	45/22	36/17
N_{tr}	757	2510	2432	2509	761
$N_{par} = 51$	$N_{lev} = 2989$	$d_{rms} = 1{,}5 \times 10^{-4} см^{-1}$			

Заключение. В результате анализа спектра было проинтерпретировано примерно 6000 линий. При решении обратной спектроскопической задачи получено 13 спектроскопических параметров с погрешностью, не превышающей экспериментальную (1,5*10^{-4} см$^{-1}$).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lebron G.B., Tan T.L. Improved rovibrational constants for the v_{12} band of C_2H_3D // J Mol. Spectrosc. – 2011. – № 265. – С. 55-7.
2. P. Herbin, Ch. Blanquet Vibrational-rotation analysis of C_2H_3D from 725 to 1170 cm // J Mol. Spectrosc.. – 1988. – № 127. – С. 390-398.
3. J.M.L. Martin, T.J.Lee, P.R.Taylor The anharmonic force field of ethylene, C_2H_4, by means of accurate ab initio calculations // J.Chem, Phys. – 1995. – № 103. – С. 2589-2602.
4. К.Б. Берёзкин, А.Л. Фомченко, К. Леруа, В.-М. Хорнеман, Е.С. Бехтерева Исследование фурье-спектра высокого разрешения полосы $\nu_3+\nu_4$ молекулы $^{13}CH_3D$ // Известия высших учебных заведений. Физика. 2016. – Т. 59, № 9. — С. 3-9.
5. И.А. Конов, Ю.В. Чертавских, А. Л. Фомченко, Ю. С. Аслаповская, С. А. Жданович, К. Зидо Анализ фурье-спектра высокого разрешения полосы ν_6 молекулы cis-$C_2H_2D_2$ // Известия высших учебных заведений. Физика. 2015 Т. 58, № 11 – С. 95-99.
6. Бабиков Ю.Л., Барб А., Головко В.Ф., Михайленко С.Н., Тютерев Вл.Г Интернет-коллекции по молекулярной спектроскопии.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЛИННЫХ ВОЛН ТИПА ЦУНАМИ С ЗАТОПЛЕННОЙ ПРЕГРАДОЙ РАЗЛИЧНОЙ ТОЛЩИНЫ

К.Н. Жильцов, К.В. Костюшин, И.М. Тырышкин

Научный руководитель: д.ф.-м.н. Б.В. Бошенятов

Национальный исследовательский Томский государственный университет,

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

E-mail: konstantin@niipmm.tsu.ru

MATHEMATICAL INVESTIGATION OF TSUNAMI-LIKE LONG WAVES INTERACTION WITH SUBMERGE DIKE OF DIFFERENT THICKNESS

K.N. Zhiltsov, K.V. Kostyshin, I.M. Tyryshkin

Scientific Supervisor: Dr. B.V. Boshenyatov

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

E-mail: konstantin@niipmm.tsu.ru

Abstract. *The results of mathematical modeling of long gravitational wave interaction with submerged dike is presented. The calculations were performed using OpenFOAM software package. A two-dimensional problem in a viscous, incompressible formulation in the Navier-Stokes equations was solved. Volume of Fluid (VOF) method for tracking the free surface was used. The effect of impermeable submerged dike of various thickness on transmission and evolution of the wave field was observed. The effectiveness of the submerge dike is estimated by evaluating the wave reflection and transmission coefficients using the energy integral method. Calculations showed that after the dike are formed vortex structures of different intensity. In these vortices focuses a large amount of wave energy. This reduces the destructive wave forces almost two-fold.*

Введение. Волны цунами – одно из самых разрушительных явлений природы, возникающих вследствие подводных землетрясений, сдвигов тектонических плит или оползней [1]. Распространяясь в открытом океане на большие расстояния, волны цунами способны сохранять свою разрушительную силу. При входе в зону мелководья их скорость резко уменьшается, но при этом растет амплитуда волны, достигая, порой, высоты в 30–35 метров. Проникая вглубь побережья на километры, волны цунами уничтожают все на своем пути. Для борьбы с волнами цунами часто пользуются самым распространенным и традиционным методом – установкой преграды на пути волны. Тем не менее, в случае возникновения очень сильных волн, даже современные барьеры оказываются бесполезны [2].

В последнее десятилетие проводиться достаточно большое количество исследований о взаимодействии длинных гравитационных волн с различными видами препятствий. Большинство работ включают как экспериментальные исследования в лабораторных условиях, так и проведение численной верификации. Иностранные работы в основном направлены на исследование взаимодействия уединенной волны с проницаемыми и непроницаемыми трапецевидными препятствия [3,4]. В российской печати в последнее время стоит отметить работу Сапрыкиной и др. [5]. Особняком стоит работа академика Фридмана и др. [6] в которой основательно исследован процесс прохождения волны через комплеск барьеров и оценено их влияние на силу берегового заплеска.

В наших предыдущих работах с помощью комплексного экспериментального и математического анализа были проведены исследования по взаимодействию волны с непроницаемой тонкой преградой. В работах [7,8] приведены основополагающие положения о коэффициентах отражения и прохождения волны, верифицирован эксперимент и численная модель. В [7] введен безразмерный коэффициент преграды, позволяющий оценивать поведение волны в гораздо большем спектре различных характерных параметров. В работе [9] был численно исследован случай взаимодействия волны с комплексом преград и подтверждены экспериментальные выводы работы [6].

Математическая модель. В работе в качестве математической модели используются уравнения Навье-Стокса для вязкой несжимаемой жидкости в двумерной постановке:

$$\nabla \mathbf{U} = 0; \tag{1}$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{U}\mathbf{U}) = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{U} + \rho g - \sigma_T k_\gamma \nabla \gamma \tag{2}$$

Для учета движения свободной поверхности жидкости использовалась метод *Volume of Fluid* (VOF):

$$\frac{\partial \gamma}{\partial t} + \nabla(\gamma \mathbf{U}) = 0 \tag{3}$$

где γ – определяет объемную долю воды в расчетной ячейке и изменяется линейно от 0 до 1 в соответствии со следующими условиями:

$$\gamma = \begin{cases} \gamma = 0, воздух \\ 0 < \gamma < 1, интерфейс \\ \gamma = 1, вода \end{cases} \tag{4}$$

Вычисления проводились с помощью пакета OpenFOAM [10]. Широко распространенный пакет с открытым исходным кодом представляет собой набор библиотек и макросов и является, по сути, языком программирования и удобным инструментом для численного моделирования.

Результаты исследования. В работе [7] был определен безразмерный коэффициент преграды $h/(H+A)$, где h – высота преграды, H – глубина спокойной воды, A – амплитуда падающей волны. Результаты эксперимента в большой гидродинамическом лотке на базе ИПРИМ РАН и численные расчеты показали, что при $h/(H+A) \approx 0{,}85$ наблюдается угасание волны, прошедшей через преграду, практически на 50%, относительно отношений энергий $W_R + W_T / W$,. Используя эти данные были проведены расчеты для полностью затопленной преграды различной толщины 0,01 м< D < 6 м. Стоит отметить, что глубина канала H = 0,103 м, амплитуда волны A = 0,007 м – постоянны для всех тестовых пусков. Стандартную оценку амплитудных коэффициентов отражения и прохождения было решено заменить интегральным методом оценки потенциальной и кинетической энергии:

$$W_{пот} = \frac{1}{2} \rho g \sqrt{gH} \int_0^t \xi^2(t) dt \tag{5}$$

$$W_{кин} = \sqrt{gH} \int_0^t \int_0^\xi \frac{\rho U^2}{2} dy dt \tag{6}$$

На рис. 1 приведены зависимости относительной суммы прошедшей и отраженной волн. Энергии расчитаны относительно полной энергии генератора. Видно, что энергия уменьшается с увеличением толщины преграды.

Заключение. Математическое моделирование взаимодействия длинных гравитационных волн с непроницаемой преградой различной длины показало, что увеличение толщины преграды приводит к уменьшению относительной энергии волны. Чем толще преграда, тем сильнее это угасание. При $D = 2\lambda$

угасание прошедшей волны может составлять вплоть до 60% от падающей волны. Это объясняется образованием вихревых структур за преградой, в которых и аккумулируется большее количество энергии.

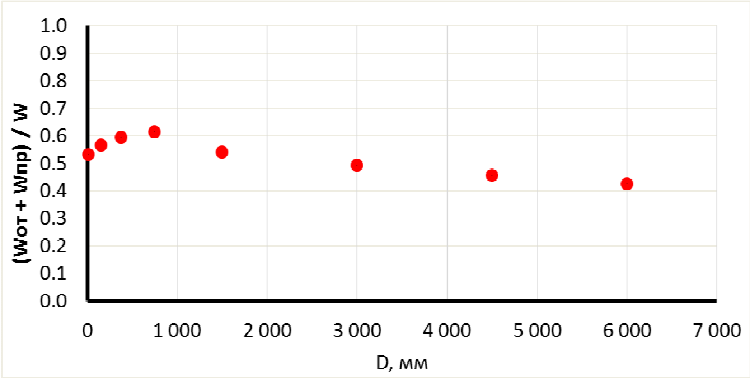


Рис. 1. Отношение сумм энергий отраженной и прошедшей волн к энергии генератора в зависимости от длинны преграды.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского Фонда Фундаментальных Исследований №15-08-04097-а.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Левин Б.В., Носов М.А. Физика цунами и родственных явлений в океане. – М.: Янус-К, 2005. – 360 с.
2. Воробьев Ю.Л., Акимов В.А., Соколов Ю.И. Цунами: предупреждение и защита – М.: МЧС России, 2006. – 264 с.
3. Irtem E., Seyfioglu E., Kabdasli S. Experimental Investigation on the Effects of Submerged Breakwaters on Tsunami Run-up Height. J. Coast. Res., 2011. SI 64, 516-520.
4. Sriram V., Didenkulova I., Sergeeva A., Schimmels S. Tsunami evolution and run-up in a large scale experimental facility. Coastal Eng. 2016. 111. 1-12.
5. Saprykina Y., Kuznetsov S., Korzinin D. Nonlinear transformation of waves above submerged structures. 8th International Conference on Asian and Pacific Coasts (APAC 2015). Procedia Eng. 2015. 116. 187–194.
6. Фридман А.Н., Альперович Л.С., Шемер Л., Пустильник Л., Штивельман Д., Марчук Ан. Г., Либерзон Д. // УФН. 2010. Т. 180. № 8. С. 843–850.
7. Бошенятов Б.В. О подавлении волн цунами подводными преградами. ДАН. 2013. Т.452. №4. С.392-395.
8. B. Boshenyatov and D. Lisin, “Modeling of Tsunami Waves in an Open Hydrodynamic Channel,” in Proceedings of the 8th International Symposium on Advanced Science and Technology in Experimental Mechanics. Report 123, (3-6 November 2013, Sendai, Japan).
9. Boshenyatov B. V., Zhiltsov K. N. Simulation of the interaction of tsunami waves with underwater barriers. AIP Conference Proceedings 1770, 030088 (2016); doi: 10.1063/1.4964030.
10. OpenFOAM Foundation. 2016. OpenFOAM. User guide.” Available at http://www.openfoam.org, 211p.

МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ УЧАСТКА ФОРМИРОВАНИЯ СПЕКТРА НЕЙТРОННОГО ПОТОКА ДЛЯ НЕЙТРОН-ЗАХВАТНОЙ ТЕРАПИИ

Е.А. Загуменный, М.Н. Аникин

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

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: Zeilt@mail.ru

MATERIALS FOR THE NEUTRON BEAMS SPECTRUM FORMATION FOR NEUTRON-CAPTURE THERAPY

E.A. Zagumennov, M.N. Anikin

Scientific Supervisor: Ph.D. A.G. Naymushin

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

E-mail: Zeilt@mail.ru

Abstract. *The title of this work is "Materials for the neutron beams spectrum formation for neutron-capture therapy", in which, using the example of existing facilities, materials are considered that are most often used to design a neutron flux filter. As a result of analysis of the material they have identified the positive aspects of their application, as well as and disadvantages that require the use of certain technological solutions. Also were shown technical solutions of the drawbacks. Also in this work was shown that it is possible to construct such device on IRT-T reactor.*

Введение. Одной из проблем современного человечества является рак. Несмотря на то, что традиционная методика лечения достигла определенных успехов в борьбе с раковыми заболеваниями, окончательно вылечить все их формы пока не удается, и альтернативой для существующих методов лечения, может быть нейтрон-захватная терапия (НЗТ), она разработана для избирательного воздействия излучения на опухоль. НЗТ – метод, при котором мощный источник излучения создается непосредственно в нужном месте человеческого организма. При глубоких залеганиях опухоли наиболее перспективным средством лечения являются эпитепловые нейтроны с энергией 0,5 эВ – 10 кэВ [1].

Достаточную для терапии плотность потока нейтронов можно получить на исследовательских реакторах, но, в требуемом спектре нейтронов наряду с эпитепловыми будут присутствовать нейтроны других энергий, а также сопутствующее гамма-излучение. Таким образом, неотъемлемой частью установки для НЗТ является участок формирования спектра – фильтр. Настоящая работа посвящена обзору конструкционных материалов, используемых, в будущем, для создания фильтра реактора ИРТ-Т.

Материалы и методы исследования. Поскольку концепция НЗТ существует уже порядка полвека, то научное сообщество определило список материалов, которые являются наиболее подходящими для конструирования фильтра, позволяющего создать пучок нейтронов с необходимым энергетическим спектром.

Одним из самых распространённых материалов по применению является алюминий, т.к. он обладает наиболее приемлемыми значениями общего ядерного сечения нейтронов различных энергий: тепловые нейтроны – максимальное значение 27 бн, эпитепловые – ~1,5 бн, быстрые – пиковые значения,

доходящие до уровня 100 бн [2]. Также, алюминий в металлическом виде не токсичен, т.е. дополнительные меры предосторожности применять не надо. Но следует отметить, что алюминий подвержен радиационному распуханию, и это необходимо учитывать при проектировании фильтра.

Ещё одним распространенным материалом является металлокерамика на основе алюминия и фтора. Благодаря добавлению фтора, у металлокерамики повышается общее значение ядерного сечения, поскольку у фтора: для тепловых нейтронов – 50 бн, для эпитепловых – 3,6 бн, для быстрых – наблюдаются пиковые значения до 136 бн [2]. Также к положительным качествам этого материала следует отнести его высокую радиационную стойкость, и его слабую токсичность [3].

Для отсеивания тепловых нейтронов наилучшим вариантом является кадмий, т.к. значение ядерного сечения для тепловых нейтронов составляет максимум 580 бн [2]. При этом кадмий, как и все металлы, подвержен радиационному распуханию, до 10-20 % от первоначального объёма, что следует учитывать при проектировании фильтра. Металлический кадмий не токсичен, опасны только его пары и растворы. Также следует учитывать, что при захвате тепловых нейтронов кадмий будет выделять гамма-излучение, в дополнение к реакторному, из этого следует, что располагать его следует до защитного слоя от гамма-излучения.

В качестве защиты пациента от вредоносного гамма-излучения применяется уже стандартный материал – свинец. Он сравнительно дешев и методика его применения хорошо отработана. Альтернативой ему могут служить висмут и вольфрам. Но висмут не используют поскольку он крайне токсичен, а вольфрам значительно дороже свинца, что делает установку ещё более дорогостоящей.

На существующей установке «TAPIRO» фильтр состоит из сплава AlF_3, а в качестве защиты от нежелательного гамма-излучения используют свинец [4].

На спроектированной отечественной установке для НЗТ «МАРС» фильтр для спектра нейтронов сконструирован из пластинок металлокерамики (56 % F, 43 % Al и 1 % LiF), для защиты пациентов также как и на «TAPIRO» применяется свинец [5].

ИРТ-Т – ядерный реактор Физико-технического института Томского политехнического университета является водо-водяным аппаратом бассейнового типа, его проект был разработан Национальным исследовательским центром «Курчатовский институт». В настоящий момент мощность реактора составляет 6 МВт. ИРТ-Т имеет 10 горизонтальных экспериментальных каналов: восемь радиальных диаметром 100 мм, два касательных канала (ГЭК-1 и ГЭК-4) диаметром 150 мм [6].

Оптимальным каналом размещения установки для НЗТ является ГЭК-1, т.к. он является касательным, что значительно уменьшает вклад быстрых нейтронов и гамма-квантов, а это, в свою очередь, существенно снижает негативное воздействие излучения на пациента.

На базе пакета программ MCU-PTR [7] была создана расчетная модель реактора с детальной проработкой существующего канала, после чего проведены расчетные исследования, в результате которых были получены следующие значения: для нейтронов с энергией от 0 до 0,5 эВ плотность потока нейтронов составила $1{,}02 \cdot 10^{9}$ $см^{-2} \cdot с^{-1}$; для нейтронов с энергией от 0,5 эВ до 10 кэВ плотность потока нейтронов – $1{,}11E \cdot 10^{8}$ $см^{-2} \cdot с^{-1}$; для нейтронов с энергией от 10 кэВ и выше – $1{,}83E \cdot 10^{8}$ $см^{-2} \cdot с^{-1}$.

Из предоставленных результатов видно, что канал ГЭК-1 реактора ИРТ-Т не обладает требуемыми характеристиками для НЗТ, однако обеспечивает высокий общий поток нейтронов. Из этого

можно сделать вывод, что для достижения требуемых параметров по спектру нейтронов нужна модернизация, и одним из её направлений является создание фильтра.

Заключение. При выполнении настоящей исследовательской работы на примере зарубежных и отечественных установок для НЗТ определены основные конструкционные материалы, необходимые для получения требуемого спектра нейтронного потока, преимущественного эпитеплового и без вредоносного гамма-излучения. У каждого материала были выявлены положительные стороны их применения, а также недостатки, которые требуют использования определенных технологических решений.

Наиболее распространёнными материалами для общей фильтрации нейтронов являются алюминий, сплавы алюминия, металлокерамика и т.д. Для устранения нежелательного гамма-излучения используют чаще всего свинец, а для тепловых нейтронов – кадмий и бор [4,5].

Общая цель исследования – проектирование установки для НЗТ, а в последующем её сборка на канале ГЭК-1 реактора ИРТ-Т. Для этого поставлена первичная задача по проектированию фильтра нейтронного потока в канале. Благодаря этому будет получен требуемый спектр потока нейтронов для терапии. В разработке фильтра, будут учтены все современные тенденции по данному вопросу, выбрана оптимальная геометрическая форма и материалы.

Наиболее перспективно видно применение металлокерамики на основе алюминия, в качестве альтернативы можно опробовать сплав – Al_2O_3. Для защиты от гамма-излучения будет использоваться свинец, а для отчистки спектра нейтронов от тепловых нейтронов – кадмий.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Купленников Э.Л. Нейтроны и онкология / Э.Л. Купленников, А.Н. Довбня, С.С. Кандыбей, А.И. Тутубалин, В.В. Красильников // Научные ведомости: математика. Физика. – 2012. – N 23. – С. 151-176.
2. N. Soppera, M. Bossant, E. Dupont, "JANIS 4: An Improved Version of the NEA Java-based Nuclear Data Information System", Nuclear Data Sheets, Volume 120, June 2014, Pages 294-296.
3. International Atomic Energy Agency. Current status of neutron capture therapy //IAEA-TECDOC-1223. – 2001.
4. Кураченко Ю.А., Моисеенко Д.Н. МАРС и ТАРІRO: реакторы малой мощности для нейтроно-захватной терапии / Ю.А. Кураченко, Д.Н. Моисеенко// Известия вузов: ядерная энергетика. – 2010. – N 1. – С. 153-163.
5. Кураченко Ю.А. Реакторные пучки для лучевой терапии: Автореф. дис ... д-ра физ.–мат. наук: – Обнинск, 2008. – 37 с.
6. Бать Г.А., Коченов А.С., Кабанов Л.П. Исследовательские ядерные реакторы. – М.: Атомиздат, 1985. – 278 с.
7. 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. – С. 149-156.
8. Борисов Г.И. Физические основы нейтроно-захватной терапии: Автореф. дис ... д-ра физ.–мат. наук: – Москва, 2012. – 50 с.

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПЛАЗМЕННОЙ КОНВЕРСИИ ОТВАЛЬНОГО ГЕКСАФТОРИДА УРАНА

Н.В. Тундешев[1,2], Р.У. Кулиев[2], В.В. Зубов[1]

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

[1]НИ «Томский политехнический университет», Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050

[2]АО«ПО«Электрохимический завод», Россия, г. Зеленогорск, ул. Промышленная, 1, 663690

E-mail: kaberne1812@yandex.ru

MODELING AND RESEARCH OF PROCESS OF DUMP URANIUM HEXAFLUORIDE PLASMA CONVERSION

N.V. Tundeshev[1,2], R.U. Kuliev[2], V.V. Zubov[1]

Scientific Supervisor: lecturer, Phd. A.G. Karengin; head of the department “TPh”, Ph.D. I.V. Shamanin

[1]Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, 30, Lenin str., 634050

[2]Electrochemical plant, Russia, Zelenogorsk, 1, Industrial str., 663690

E-mail: kaberne1812@yandex.ru

Abstract. *This article shows results of thermodynamic modeling of treatment on uranium compositions in water-steam plasma for uranium nitrous-oxide production. Compositions are based on uranium hexafluoride, water vapor. Process was carried out for widely temperature and mass fraction ranges of water-steam plasma coolant at some UF_6:H_2O molar ratios. Optimal consists of uranium compositions and modes for practical application were determined.*

Введение. На сегодняшний день единственной технологией конверсии обедненного по изотопу уран-235 (отвального) гексафторида урана (ОГФУ) является технология его последовательного гидролиза до уранилфторида и пирогидролиза уранилфторида до закиси-окиси урана (ЗОУ) в различном аппаратурном исполнении [1,2]. Значительными недостатками данной технологии являются:

- многостадийность;
- высокие энерго- и трудозатраты;
- значительная потребность в химических реагентах (перегретый водяной пар, азот, водород);
- относительно низкая концентрация производимого фтористого водорода до ~ 80%;
- высокая стоимость процесса конверсии.

Альтернативным методом может являться технология конверсии ОГФУ в воздушной плазме.

Материалы и методы исследования. Рассмотрим последовательности химических превращений, реализуемых в технологии гидролиз ОГФУ – пирогидролиз уранилфторида (реакции 1–3) и в перспективной плазмохимической технологии.

$$UF_6+2H_2O\leftrightarrow UO_2F_2+4HF;\ \Delta H = 177{,}8\ кДж. \quad (1)$$

$$UO_2F_2+H_2O\rightarrow UO_3+2HF;\ \Delta H = 250{,}5\ кДж. \quad (2)$$

$$6UO_3\rightarrow 2U_3O_8+O_2. \quad (3)$$

Из анализа представленных реакций видно, что процесс пирогидролиза уранилфторида до ЗОУ протекает за счет реакций (2) и (3). Данный факт отмечается авторами работ [1, 2].

Для прямой плазменной конверсии ОГФУ предлагается использование воздушно-плазменного потока, генерируемого высокочастотным плазмотроном.

Одним из основных параметров горения газовоздушных смесей является температура горения, которая определяется по формуле [3]:

$$T_{см} = \frac{Q_н^{см} + \alpha \cdot m_{ок} \cdot c_{ок} \cdot t_{ок}}{V_{пр} \cdot c_{пр}}, \text{ К} \quad (1)$$

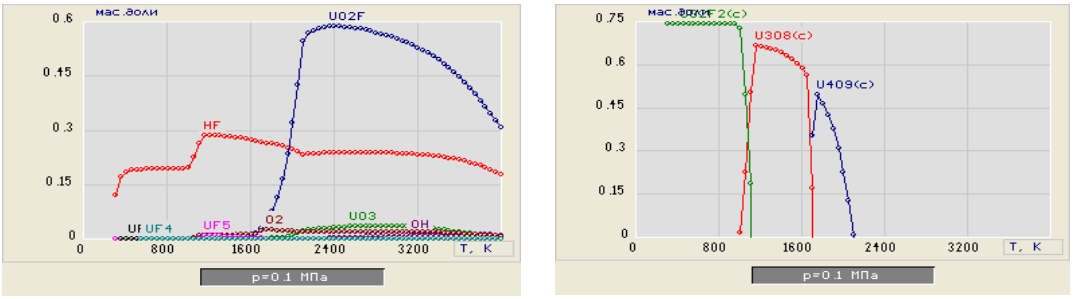
где:

$Q_н^{см}$ - низшая теплота сгорания газовоздушной смеси (кДж/кг), 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 (м3), $c_{пр}$ - удельная теплоемкость продуктов горения (кДж/м3·град).

Для определения оптимальных режимов процесса плазмохимической конверсии ОГФУ были проведены расчеты равновесных составов газообразных и твердофазных продуктов. Расчеты равновесных составов и основных термодинамических параметров проводились с использованием лицензионного программного пакета «TERRA» при давлении 0,1 МПа в диапазоне температур (1000–4000) К и изменяемой массовой доле воздушного плазменного теплоносителя.

Вывод об оптимальности режима проводился на основании стабильного формирования ЗОУ без значительного содержания переходных оксифторидов при рабочих температурах ~1500 К. В качестве целевого продукта выбрана ЗОУ. Дополнительными условиями оптимальности режима плазменной конверсии являлись максимальное связывание фтора в виде фтористого водорода при минимальном содержании воды.

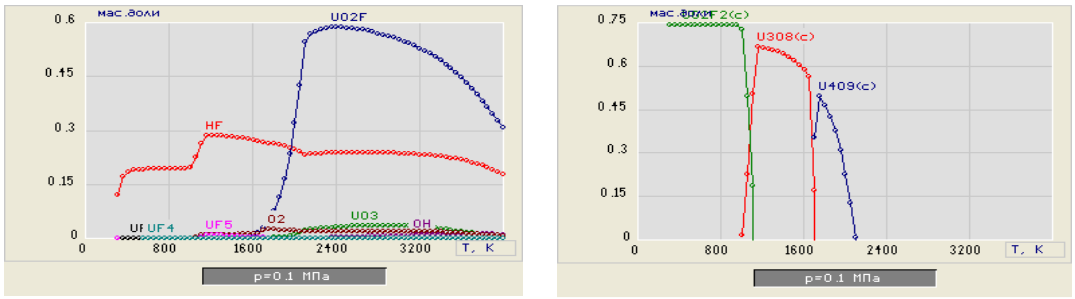
Результаты. На рисунках 1-3 представлены газообразные фторсодержащие (а), газообразные урансодержащие (а) и конденсированные продукты (б) конверсии ОГФУ в составе оптимальной композиции при содержании пароводяного теплоносителя 10 % масс., 15 % масс. и 25 % масс. соответственно.



(а) *(б)*

Рис.1. Газообразные (а) и конденсированные (б) продукты конверсии ОГФУ

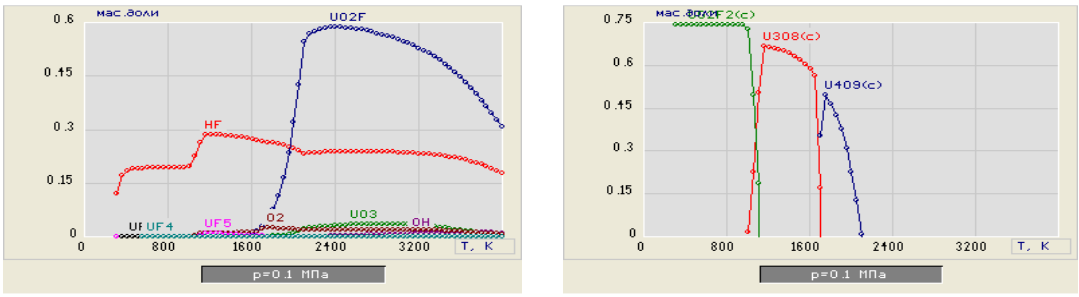
При температурах 1150÷1700 К с максимальным выходом образуется целевой продукт – закись-окись урана U_3O_8(c) в конденсированной фазе.



(а) *(б)*

Рис.2. Газообразные (а) и конденсированные (б) продукты конверсии ОГФУ

При температурах 1000÷1700 К с максимальным выходом образуется целевой продукт – закись-окись урана U_3O_8(с) в конденсированной фазе.



(а) *(б)*

Рис.3. Газообразные (а) и конденсированные (б) продукты конверсии ОГФУ

При температурах 900÷1650 К с максимальным выходом образуется целевой продукт – закись-окись урана U_3O_8(с) в конденсированной фазе.

Заключение. С учётом полученных результатов могут быть рекомендованы для практической реализации процесса плазменной конверсии ОГФУ следующие оптимальные режимы:

- состав пароводяной смеси (85 % ОГФУ : 15 % вода);
- интервал рабочих температур: (1000–1700) К;

Результаты проведенных исследований могут быть использованы при разработке альтернативной отечественной энергоэффективной технологии конверсии отвального гексафторида урана до закиси-окиси урана.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Туманов Ю.Н. Плазменные и высокочастотные процессы получения и обработки материалов в ядерном топливном цикле: настоящее и будущее. – М.: Физматлит, 2003. – 760 с.
2. Пат. FR. 2162058 C01G43/025. Способ и установка для непосредственного превращения гексафторида урана в оксид урана/ Фэгер Андре.
3. Бернадинер М.Н., Шурыгин А.П. Огневая переработка и обезвреживание промышленных отходов. – М.: Химия, 1990. – 304 с.

ИССЛЕДОВАНИЕ УСЛОВИЙ ЗАРЯЖАНИЯ ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ НАЧАЛЬНОЙ СКОРОСТИ МЕТАНИЯ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ НАЧАЛЬНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

А.И. Зыкова, А.С. Дьячковский

Научный руководитель: профессор, д-р.ф-м.н А.Н. Ищенко

Национальный исследовательский Томский государственный университет,

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

E-mail: Arven2022@mail.ru

STUDY OF LOADING CONDITIONS TO INCREASE THE INITIAL PROJECTILE VELOCITY AT DIFFERENT INITIAL TEMPERATURES

A.I. Zykova, A.S. Diachkovskii

Scientific Supervisor: Prof., Dr. A.N. Ishchenko

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

E-mail: Arven2022@mail.ru

Abstract. *The main characteristics of ballistic experiment are the maximum pressure in the combustion chamber P_{max} and the projectile velocity at the time of barrel leaving $U_Д$. During the work the burning law of the new high-energy fuel was determined in a ballistic experiment for different initial temperatures. This burning law was used for a parametric study of depending P_{max} and $U_Д$ from a powder charge mass and a traveling charge was carried out. The optimal conditions for loading were obtained for improving the initial velocity at pressures up to 600 MPa for different initial temperatures.*

Введение. Одной из основных задач внутрибаллистического проектирования артиллерийских систем является повышение скорости снаряда на вылете из ствола. На данный момент одна из перспективных схем выстрела – схема выстрела с использованием присоединенного заряда (ПЗ). Присоединенный заряд располагается непосредственно за снарядом и движется вместе с ним по каналу ствола, обеспечивая тем самым перераспределение давления на торце снаряда и дополнительный реактивный подгон. Настоящая работа способствует совершенствованию традиционного артиллерийского вооружения.

Целью данной работы было определение закона горения нового пастообразных топлива при различных начальных температурах (T_0) на основании анализа результатов серии баллистических экспериментов на модельной установке; расчет максимально возможных начальных скоростей снаряда в допустимом диапазоне давлений (600 МПа) и необходимой для этого компоновки пороха и топлива ПЗ, которые определялись путем параметрических исследований.

Методы исследования. При теоретическом анализе считалось, что пороховой заряд в камере мгновенно воспламеняется ПЗ воспламеняется через некоторое время после начала горения порохового заряда в камере. Горение ПЗ характеризуется периодами более медленного и более быстрого горения: момент воспламенения задается импульсом задержки воспламенения $I = I_1$, а момент перехода определяется достижением импульсом значения импульса перехода в ускоренный режим горения $I = I_2$.

Для исследования приведенной схемы метания использовалась математическая модель [1], а так же программный комплекс [2], разработанные в НИИ ПММ ТГУ.

Результаты. В результате проведенных расчетов был получен закон горения нового топлива ПЗ для различных начальных температур. Экспериментально неизмеряемые величины, такие как давление форсирования, трение при движении по стволу и параметры закона горения определялись как параметры согласования расчетных и экспериментальных данных при решении прямой задачи внутренней баллистики. То есть в серии расчетов они меняются в определенном диапазоне с целью достижения максимально возможного совпадения экспериментальных и расчетных величин максимального давления в камере P_{max} и начальной скорости на дульном срезе $U_Д$, и соответственно кривых зависимости давления и скорости снаряда от времени $P(t)$ и $U(t)$. При этом использовались штатные параметры порохового заряда.

Рассогласование экспериментальных и расчетных величин не превышает допустимых пределов. Полученные законы горения использовались для дальнейшего исследования связи параметров заряжания с дульной скоростью снаряда при различной начальной температуре заряда.

На рисунке 1 показан характерный график, на котором видно, как в ходе исследования изменялась масса штатного заряда в камере и масса присоединённого заряда. Изолинии максимальных давлений (штриховые) позволяют определить, какую максимально возможную скорость можно получить при данном максимальном давлений и необходимые массы порохового и присоединенного зарядов.

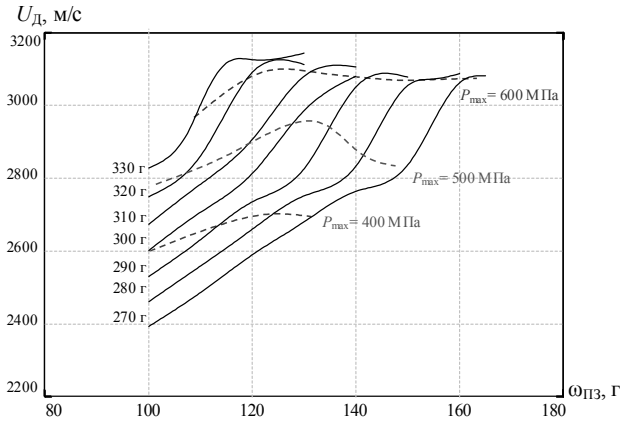
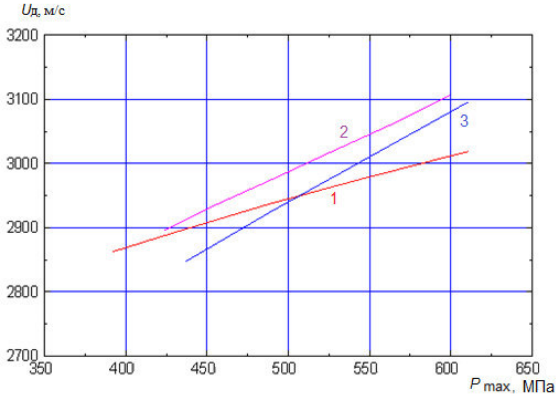


Рис. 1. Зависимость начальной скорости от массы ПЗ при различной массе пороха (T_0 = – 50 °С)

Зависимость максимально возможной скорости от заданного максимально давления в камере при T_0 = 20 °С приведена на рисунке 2. В ходе исследования импульсы задержки менялись вместе с массой пороха и ПЗ. Таким образом, на рисунке 2 представлены подобранные оптимальные для начальной температуры заряда + 20 °С импульсы перехода в ускоренный режим горения I_2, при которых достигаются наилучшие значения начальной скорости в допустимом диапазоне давления. Видно, что изменение импульса I_2 позволяет повысить максимально возможную скорость при конкретном максимальном давлении в камере. Характерная зависимость максимальной скорости от импульса I_2 при фиксированном максимальном давлении (580 МПа) приводится на рисунке 3 для начальной температуры заряда + 40 °С. На практике существуют механические и химические механизмы обеспечения задержки, но наиболее практичной следует считать конструкцию с химическим замедлителем.



1 – I_2=0,26 МПа·с; 2 – I_2=0,26 МПа·с; 3 – I_2=0,3 МПа·с;

Рис. 2. Зависимость начальной скорости от максимального давления при различных импульсах I_2, массе пороха и массе ПЗ (T_0 = + 20 °С)

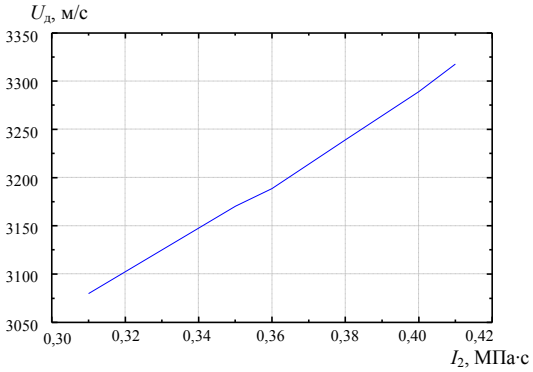


Рис. 3. Зависимость начальной скорости от импульса I_2 при прочих равных условиях (T_0 = + 40 °С)

Выводы. В ходе данной работы проведено комплексное исследование топлива, а так же его потенциальные возможности при заданных лабораторных условиях. Получены параметры закона горения, а так же проведено параметрическое исследование для определения возможности увеличения начальной скорости снаряда на дульном срезе в диапазоне давлений не больших 600 МПа. Получены конкретные значения изменяемых параметров, при которых для начальной температуры – 50 °С скорость удалось увеличить на 29,1 %, для начальной температуры + 20 °С на 14,6 %, а для начальной температуры + 40 °С на 22,4 %, относительно значения, полученного в эксперименте.

В статье использованы результаты, полученные в рамках Программы повышения конкурентоспособности ТГУ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ищенко А.Н., Касимов В.З. Математическая модель и программный комплекс для теоретического исследования внутрибаллистических процессов в ствольных системах: Учеб. пособие // Издательский Дом Томского государственного университета. – Томск, 2015.
2. Касимов В. З. Программный комплекс для расчета внутрибаллистических процессов в ствольных системах // Известия РАРАН. -2005. -№1. - С. 70-76.

ИССЛЕДОВАНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА МОЛЕКУЛЫ ТРАНС-$C_2H_2D_2$ В ДИАПОЗОНЕ 1450-1650 $СМ^{-1}$

А.Г. Зятькова

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

RO-VIBRATIONAL ANALYSIS OF THE TRANS-$C_2H_2D_2$ MOLECULE IN REGION OF 1450-1650 CM^{-1}

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. *Present work is a continuation of our extensive high resolution study of ethylene. Ro-vibrational spectrum of the trans-$C_2H_2D_2$ molecule has been recorded in the region of 1450–1650 cm^{-1} where the hybrid $\nu_7 + \nu_8$ band is located. The Ground State Combination Differences method is used for the spectra assignment. As a result more than 600 transitions of a- and b-types were founded belonging to the $\nu_7 + \nu_8$ band. Energy structure of the ($\nu_7 = \nu_8 = 1$, B_u) state is determined on the basis of assigned transitions. Further, for the inverse spectroscopic problem solution the Effective Hamiltonian model taking into account Coriolis-type interactions between states ($\nu_7 = \nu_8 = 1$, B_u) and ($\nu_8 = \nu_{10} = 1$, A_u) is used. 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. Для многих задач науки и техники важным является знание внутренних свойств и фундаментальных характеристик молекул. Методы молекулярной спектроскопии дают возможность извлечь из полученной экспериментальной информации структурные постоянные, параметры силового поля, дипольные моменты молекулы, моменты инерций, энергетическую колебательно-вращательную структуру. Подобного рода информация является чрезвычайно важной при решении многих не только академических, но и прикладных задач физики, химии, астрофизики, атмосферной оптики и других областей науки.

Объектом исследования данной работы является колебательно-вращательный спектр высокого разрешения молекулы транс-$C_2H_2D_2$. Интерес в изучении этой молекулы мотивирован как прикладными, так и академическими приложениями. Исследуемая молекула является дейтерированным изотопологом молекулы этилена, C_2H_4. Для исследования молекулы C_2H_4, 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. Исследования спектров изотопологов молекул, помогает более точно определить вид потенциальной поверхности материнской молекулы. С другой стороны, этилен, является природным компонентом атмосферного воздуха, который оказывает влияние на химический состав атмосферы,

обмен веществ млекопитающих и глобальный климат. У растений является своеобразным растительным гормоном. Этилен — самое производимое органическое соединение в мире. Отметим, что в реальной смеси газов, например, в атмосферном воздухе, кроме самих молекул, по разным причинам, возникают их изотопологи. Большую роль исследование спектров молекулы этилена и ее изотопологов играет также в астрофизике, планетологии, так как она 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 транс-$C_2H_2D_2$ и извлечения из них высокоточной количественной информации. В соответствие с вышесказанным, **целью данной работы** является решение обратной спектроскопической задачи, т.е. получения параметров гамильтониана, на основе экспериментальной информации, извлеченной из спектра.

Анализ спектра высокого разрешения полосы $\nu_7+\nu_8$ молекулы транс-$C_2H_2D_2$. Молекула транс-$C_2H_2D_2$ – это дейтерированный изотополог этилена, C_2H_4. Полоса $\nu_7+\nu_8$ (B_u) с центром 1586,1889 см$^{-1}$ вследствие симметрии имеет гибридный тип. Таким образом, в спектре должны наблюдаться одновременно переходы как a-, так и b- типа. Правила отбора, соответствующие разрешенным переходам a- и b- типов имеют вид: $\Delta J = 0,\pm1; \Delta K_a = 0; \Delta K_c = \pm1$ и $\Delta J = 0,\pm1; \Delta K_a = \pm1; \Delta K_c = \pm1$, соответственно. Ранее в работе [1] была рассмотрена полоса $\nu_7+\nu_8$, однако были найдены переходы только *a*-типа, поскольку они являются более интенсивными по сравнению с переходами типа *b*. В настоящем исследование впервые найдены переходы *b*- типа и включены в решение обратной спектроскопической задачи вместе с сильными компонентами *a*-типа. В результате, это позволило получить больше экспериментальной информации о полосе $\nu_7+\nu_8$.

Для решения задачи была выбрана гамильтониан типа Уотсона для молекулы типа асимметричного волчка в *A*-редукции и I^r-представлении [2]. Фрагмент использованного оператора диагонального блока имеет следующий вид:

$$H^{vv} = E^v + \left[A^v - \frac{1}{2}\left(B^v + C^v\right)\right]J_z^2 + \frac{1}{2}\left(B^v + C^v\right)J^2 + \frac{1}{2}\left(B^v + C^v\right)J_{xy}^2$$
$$- \Delta_K^v J_z^4 - \Delta_{JK}^v J_z^2 J^2 - \Delta_K^v J^4 - \delta_K^v\left[J_z^2, J_{xy}^2\right]_+ - 2\delta_J^v J^2 J_{xy}^2 + ...,$$

где $A^v, B^v, C^v, \Delta_K^v, \Delta_{JK}^v, \Delta_J^v$ - вращательные параметры и параметры центробежного искажения; *E* – центр полосы, оператор $J_{xy}^2 = J_x^2 - J_y^2$, $\left[A,B\right]_+ = AB + BA$.

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 1450-1650 см$^{-1}$ с разрешением 0,0025 см$^{-1}$ при комнатной температуре.

В этом спектральном диапазоне локализованы две полосы поглощения, а именно, $\nu_8+\nu_{10}$ и $\nu_7+\nu_8$ (в качестве иллюстрации на Рис. 1 показан спектр молекулы транс-$C_2H_2D_2$ в диапазоне 1450-1650 см$^{-1}$, а также фрагмент Q-ветви полосы $\nu_7+\nu_8$). Полоса $\nu_8+\nu_{10}$ ранее не исследовалась, так как переходы в спектре обладают малыми интенсивностями, что приводит к проблеме интерпретации такого рода полос. Поэтому при анализе данная полоса была взята как темная, параметры гамильтониана фиксированы

параметрам основного состояния из работы [3]. Анализ спектра проводился на основе метода комбинационных разностей.

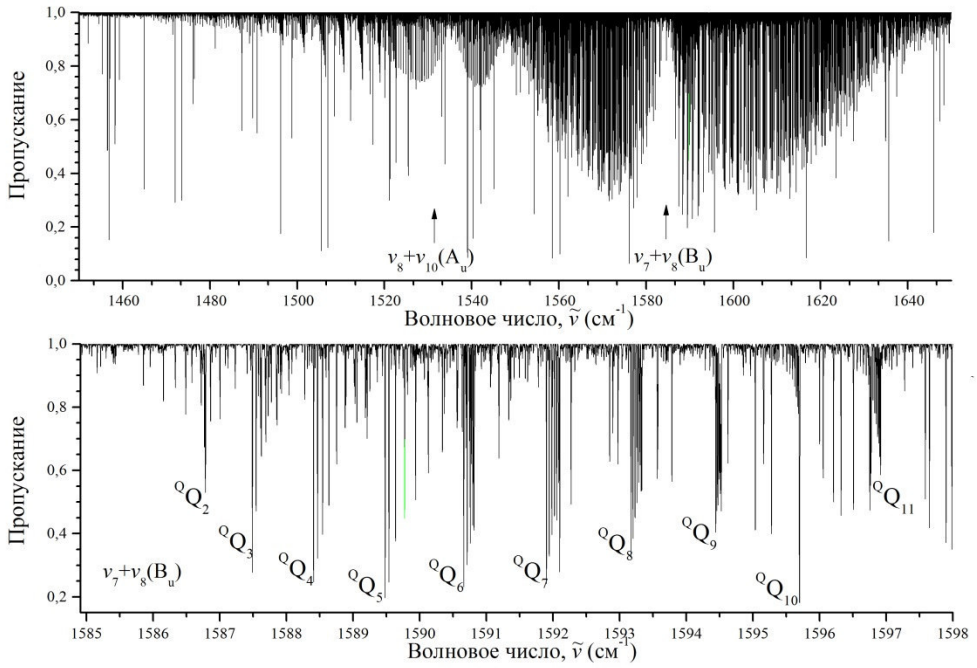


Рис. 1. Активные в инфракрасном поглощении колебательно-вращательные полосы молекулы транс-$C_2H_2D_2$ в области 1450-1650 см$^{-1}$.

Результаты. В результате решения обратной спектроскопической задачи получено 14 параметров, описывающих вращательную структуру колебательного состояния (v_7 =v_8 =1, B_u). Резонансные параметры C_z^{12} и C_x^{12} были оценены теоретически, положены равными -3,697 и -1,100, соответственно, и не варьировались. На основе анализа экспериментальных данных было определено более 600 ($J^{макс.}$=30, $K_a^{макс.}$=16) энергетических уровней. В таблице 1 представлена часть полученных спектроскопических параметров для полосы v_7+v_8 (числа в скобках – 66% доверительные интервалы для полученных значений параметров). Полученные параметры воспроизводят исходные данные с точностью сравнимой с экспериментальной погрешностью в определении положения линии (среднеквадратичное отклонение 0,00026 см$^{-1}$).

Исследование выполнено при финансовой поддержке Томского политехнического университета по программе ВИУ-ФТИ-24/2016. Часть работы поддержана грантом РФФИ в рамках научного проекта № 16-32-00306 мол_а.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hegelund F. The high-resolution infrared spectrum of the v_7 + v_8 and v_4 + v_8 bands of trans-d2-ethylene //J.Mol. Spectrosc. – 1989. –V. 135. –P. 45-58
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.
3. Tan T.L., Ng L.L., Gabona M.G. The hybrid A/B type v_{12} band of trans-ethylene-1,2-d2 by high-resolution Fourier transform infrared spectroscopy// J.Mol. Spectrosc. – 2015. – V 312. – P. 6–12

МОДИФИКАЦИЯ Ni НАНОТРУБОК ПУТЕМ ИМПЛАНТАЦИИ ИОНОВ C^{3+}

А.Д. Ибраева, А.Л. Козловский, Д.И. Шлимас

Научный руководитель: профессор, д.ф.т.н. К.К. Кадыржанов

Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева,

Казахстан, г. Астана, ул. Сатпаева, 2, 010008

E-mail: anelusha1991@mail.ru

MODIFICATION OF Ni - NANOTUBES BY IMPLANTING IONS C^{3+}

A.D. Ibraeva, A.L. Kozlovskiy, D.I. Shlimas

Scientific Supervisor: Prof. K.K. Kadyrzhanov

L.N. Gumilyov Eurasian National University, Kazakhstan, Astana, Satpaev str., 2, 010008

E-mail: anelusha1991@mail.ru

Abstract. *Using PET track-etched membranes with thickness of 12 μm as template, polycrystalline nickel nanotubes with outer diameter of 380 nm and wall thickness 95 nm were synthesized by electrochemical method. A comprehensive study of the structural, morphological and electrical characteristics of irradiated at different conditions Ni nanotubes was carried out. The ability of modification of structural parameters such as lattice parameters and the average size of crystallites and conductivity of Ni nanotubes by irradiated with C^{3+} ions with energy 1.75 MeV/nucleon and fluence ranging from 1 × 10^{9} to 5 × 10^{11} cm^{-2} was shown.*

Введение. Для определения лимитирующих факторов, позволяющих устройствам работать в экстремальных условиях, необходимо понимать какое влияние оказывает ионизирующего излучения на структуру и электрические свойства элементов, влияющих на производительность и стабильность работы устройства. Облучение различных видов материалов пучками высокоэнергетичных ионов является высокоэффективным способом контролируемой модификации структурных, оптических и электрических свойств в современном материаловедении [1,2]. Облучение твердых наноразмерных тел значительно повышает количество атомных дефектов в структуре: когда энергетическая частица (электрон, тяжелый ион или нейтрон) проникают в твердое тело, они переносят свою энергию встречным атомам вдоль траектории своего движения, в большинстве случаев за счет многочисленных процессов ионизации, электронной экситации, а также смещения атомов с первоначальных позиций. Потеря энергии электронов является главным механизмом в случае облучение пучком ускоренных ионов с высокой энергией [3]. Локальные повреждения, вызванные переносом энергии материалу и последующая релаксация системы, определяют область модификации исследуемого материала, при этом путем варьирования условий облучения (энергия, флюенс, тип ионов, используемых для облучения) можно направленно модифицировать свойства наноразмерных материалов [4]. В результате облучения создается каскад точечных дефектов, а также скопление данных дефектов, которые способны деформировать кристаллическую решетку наноструктур.

Экспериментальная часть. Синтез Ni - нанотрубок проводился в порах трековых мембран на основе полиэтилентерефталата (ПЭТФ) типа Hostaphan® производства фирмы «Mitsubishi Polyester Film» (Германия) толщиной 12 мкм с плотностью пор 4x10^{7} $см^{-2}$ при диаметрах 400 нм. Активирование COOH

связей, образующихся на поверхности стенок пор в результате химического травления треков от тяжелых ионов, проводилось при УФ-сенсибилизации ПЭТФ шаблонов. Эта процедура позволила создавать на стенках пор локализованные заряженные состояния, которые способствовали получению трубчатой формы НС на этапе электрохимического осаждения. Электрохимическое осаждение проводилось при разности потенциалов 1,75 В с использованием электролита: $NiSO_4 \times 6H_2O$ (100 г/л), H_3BO_3 (45 г/л), $C_6H_8O_6$ (1.5 г/л) при температурах 25ºС, pH раствора электролита был равен 3.

Результаты и обсуждение. Согласно проведенным расчетам в программном комплексе«SRIM 2013 Pro» максимальная длина пробега ионов C^{3+} в медных наноструктурах составляет 10,4 мкм. При взаимодействии налетающих ионов с атомами решетки возможно резкое зигзагообразное изменение траектории от первоначального направления. При этом, при больших энергиях налетающих частиц начинает доминировать электронное торможение, при этом траектория движения налетающих частиц практически не отклоняется от первоначального направления. При прохождении ионов C^{+3} наблюдается увеличение температурного нагрева образцов по глубине, вызванного процессами ионизации и неупругими столкновениями. В результате чего на глубине образца 9 – 10 мкм наблюдается значительное увеличение вклада в дефектообразование от локального нагрева, вследствие которого происходит увеличение тепловых колебаний решетки, что способно привести к изменению кристаллической структуры, частичной аморфизации и изменению электронных оболочек атомов. Наибольшие фононные потери наблюдаются на глубине 9,9 – 10,6 мкм, что обусловлено миграцией выбитых электронов взаимодействующих с электронными оболочками, а также друг с другом.

Характеризация НТ с точки зрения наличия в их структуре углерода проводилась методом ЭДА. Согласно полученным данным, атомное соотношение никеля в исходном образце нанотрубок составляет 100% и остается неизменным до доз облучения 5×10^{10} см$^{-2}$. Превышение этой дозы позволяет регистрировать в спектрах ЭДА пика углерода (Kα – серия – 0.277 кэВ). Увеличение дозы облучения приводит не только к росту его интенсивности, но и к изменению интенсивностей линий никеля Kα – серии при 7.474 кэВ и Lα – серии 0.849 кэВ, что может быть обусловлено изменением структуры нанотрубок в результате взаимодействия ионов углерода с кристаллической решеткой. В таблице 1 представлены результаты ЭДА анализа изменения элементного состава Ni - нанотрубок в результате облучения ускоренными ионами C^{3+} с различным флюенсом.

Таблица 1

Изменение химического состава исследуемых образцов в зависимости от флюенса облучения, ат.%

№ образца	Флюенс, м$^{-2}$	Ni–НТ	
		C^{3+}	
		Ni	C
1	0	100	0
2	1×10^9	100	0
3	1×10^{10}	97	3
4	5×10^{10}	93	7
5	1×10^{11}	91	9
6	5×10^{11}	79	21

Механизмы потери энергии осуществляются через возбуждение и ионизацию атомов мишени. Рекомбинация ионизированных атомов и электронов является параллельными процессами. Энергия, освободившаяся в процессе рекомбинации и девозбуждения атомов, представляет собой тепловую

энергию. Это тепловая энергия может оказать негативное влияние на кристаллическую структуру. Во-первых, тепловая энергия может привести к увеличению амплитуды колебаний решетки и, следовательно, тепловому расширению решетки, т. е. образуются дополнительные вакансии (дефекты Шоттки). Во-вторых, увеличение амплитуды колебаний кристаллической решетки приведет к увеличению расстояния между носителями заряда. В-третьих, тепловая энергия может вызвать деформации решетки и, таким образом, изменение различных одномерных, двумерных и трехмерных дефектов в кристаллической решетке. Рентгеноструктурный анализ образцов Ni - нанотрубок до и после облучения ионами C^{3+} показал, что исследуемые образцы представляют собой поликристаллические структуры, причем вид дифрактограмм свидетельствует о дифракции на наноразмерных объектах. Исходные образцы Ni - нанотрубок представляют собой поликристаллические структуры с ГЦК–фазой без наличия примесных карбидных фаз, с параметрами элементарной ячейки a= 3,5223 Å, отличающимися от эталонного значения (a=3,5154 Å, PDF # 031051). При этом, с увеличением дозы облучения выше 5×10^{10} $см^{-2}$ наблюдается появление пиков, характерных для нестехиометрических карбидов NiC_x с индексами Миллера (114) при 2θ=36.2º, что подтверждает результаты ЭДА. Снижение интенсивности пиков является показателем ухудшения степени кристалличности в результате возникновения дополнительных дефектов в структуре, образованием точечных дефектов, дефектов кластеров и частичной аморфизации.

Заключение. Ni нанотрубки длиной 12 мкм, внешним диаметром 380±10 нм и толщиной стенок равной 95 нм получены в порах ионно-трековых мембран на основе ПЭТФ методом шаблонного синтеза. Проведена модификация структуры нанотрубок посредством облучения ионами C^{3+} с энергией 1.75 МэВ/нуклон с флюенсом облучения от 1×10^9 до 5×10^{11} $см^{-2}$. Показано, что в результате облучения с флюенсами до 5×10^{10} $см^{-2}$ происходит уменьшение среднего размера кристаллитов, входящих в состав стенок нанотрубок, и параметра элементарной ячейки.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Z. Liu, D. Zhang, S. Han, C. Li, B. Lei, W. Lu, J. Fang, C. Zhou, Single crystalline magnetite nanotubes //J. Am. Chem. Soc. – 2005. – V. 127. – P. 6.
2. S. J. Tans, M. H. Devoret, H. Dai, A. Thess, R. E. Smalley, L. J. Geerligs, C. Dekker Individual single-wall carbon nanotubes as quantum wires. // Nature. – 1997. – V. 386. – P.474.
3. H. Dai, J. H. Hafner, A. G. Rinzler, D. T. Colbert, R. E. Smalley. Nanotubes as nanoprobes in scanning probe microscopy. // Nature – 1996. – V.384. – P. 147.
4. A. Kros, R. J. M. Nolte, N. A. J. M. Sommerdijk. Conducting polymers with confined dimensions: Track-etch membranes for amperometric biosensor applications. // Adv. Mater. – 2002. – V.14. – P. 1779.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ РАСПРОСТРАНЕНИЯ РЭЛЕЕВСКОЙ ВОЛНЫ В ТИТАНОВОМ СПЛАВЕ ВТ6

Инь Хуавэй

Научный руководитель: зав. лаб. кафедры ОФ ФТИ к.т.н. Г.В. Гаранин

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: 1292307127@qq.com

STUDY PARAMETERS OF THE RAYLEIGH WAVE IN THE TITANIUM ALLOY VT6

Yin Huawei

Scientific Supervisor: lab.head, Ph.D. G.V.Garanin.

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

E-mail: 1292307127@qq.com

Abstract. *During processing and use, the surface alloy will have hydrogen embrittlement occur affecting the mechanical properties of metals. Thus, control of hydrogen embrittlement is of particular importance. In the experiment, we use the non-destructive sound wave detection method. The speed and attenuation of Rayleigh waves can assess the level and duration of service embrittlement alloys.*

Введение. В процессе изготовления и эксплуатации, на поверхности изделий из металлов и сплавов возможно проявление эффекта водородного охрупчивания, влияющего на механические свойства. Поэтому разработка методов контроля водородного охрупчивания является важной задачей. В представляемой работе, для решения данной задачи, был использован акустический неразрушающий метод контроля. Измеряя скорость и коэффициент затухания рэлеевской волны можно оценить уровень охрупчивания и длительность службы изделий из металлов и сплавов [1].

Измерение скорости. Рэлеевская волна состоит из двух волн - продольной и поперечной, которые распространяются вдоль границы полупространства с одинаковыми скоростями и затухают с глубиной [1], она локализована в поверхностном слое толщиной примерно равной длине волны λ, что в нашей работе составляет около 1,0 мм. Излучение и прием ультразвуковых волн осуществляется датчиками на основе явления обратного пьезоэффекта. Функциональная схема стенда акустических измерений для измерения скорости рэлеевской волны приведена рисунке 1 [3].

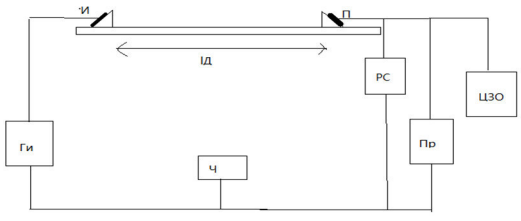


Рис.1. Функциональная схема стенда

Обозначения на рисунке 1: $l_д$ - базовое расстояние между излучателем и приемником, И - излучатель, П - приемник, Ч - частотомер, ГИ - импульсный генератор Tabor Model 8500, ЦЗО - цифровой запоминающий осциллограф Tektronix TDS2024B, РС - компьютер, Пр - генератор сигналов Agilent 33250A.

Скорость рэлеевской волны определяется методом автоциркуляции из соотношения:

$$V_{РВ} = \frac{l_{Д1} - l_{Д2}}{\frac{1}{f_{Ц1}} - \frac{1}{f_{Ц2}}} \quad (1)$$

В приведенном выражении в качестве параметров присутствуют расстояния между излучателем и приемником, и частота автоциркуляции. Проведя многократные измерения мы получаем зависимость расстояния между датчиками от величины обратной частоты автоциркуляции. График зависимости для одного из образцов приведен на рис. 2.

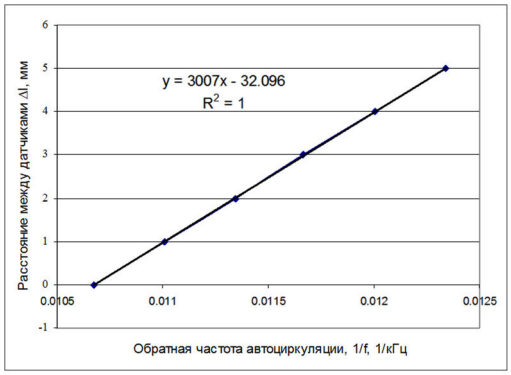


Рис. 2. График зависимости расстояния между от величины обратной частоты автоциркуляции

По экспериментальным точкам проведена линейная аппроксимация, коэффициент при x численно равен скорости распространения рэлеевской волны в образце. На рис. 3 показана скорость рэлеевской волны и ошибки её измерения всех исходных образцов, здесь ось y - скорость рэлеевской волны в м/с, ось x - номера образцов.

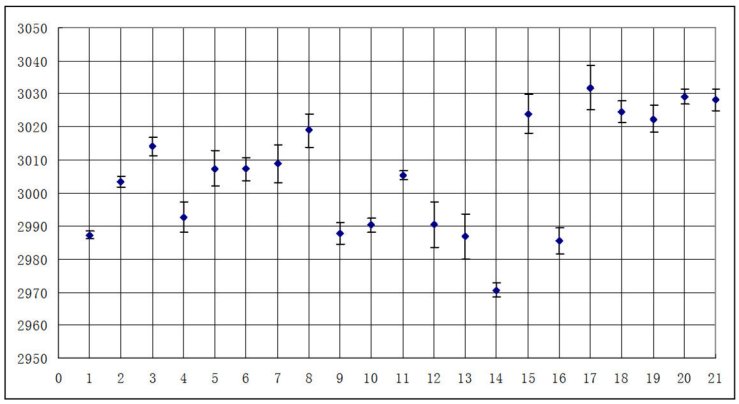


Рис. 3. Скорость рэлеевской волны и ошибка её измерения всего образца

На практике полученные значения скорости значительно различаются для разных образцов из одного материала, что требует проведения измерений для каждого образца до и после водородной обработки. Поэтому отличающиеся значения для разных образцов не будут влиять на результат исследования.

Измерение коэффициента затухания. Для ультразвуковой волны, которая распространяется в твердом теле, для амплитуды акустического давления в начале и конце участка можно записать выражение:

$$p = p_0 e^{-\alpha x}, \quad (2)$$

где α – коэффициент затухания. В нашей работе, максимальное расстояние между излучателем и приемником не превышает 30 мм, и поэтому мы наблюдаем только начальный участок экспоненциальной кривой, что делает сложным применение уравнения (2) для расчета коэффициента затухания, но можно найти параметры касательной, построенной к начальному участку кривой экспоненциального спада. На рис. 4 показаны теоретическое отношение между амплитудой и расстоянием распространения ультразвуковой волны, и полученная экспериментально зависимость нормированного значения амплитуды регистрируемого сигнала от расстояния между датчиками при измерениях.

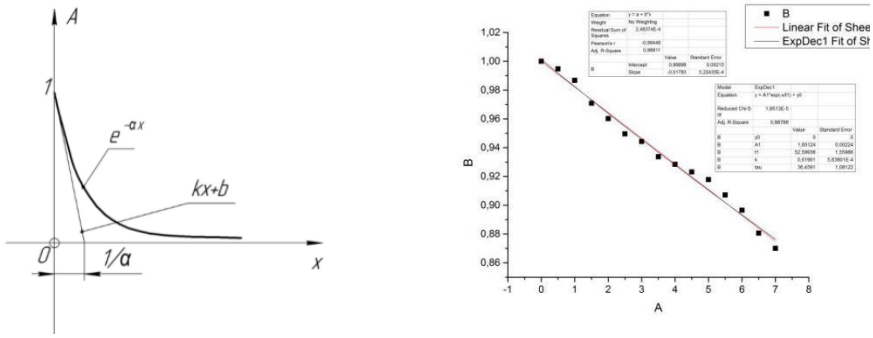


Рис. 4. Теоретическая и полученная зависимость нормированного значения амплитуды от расстояния между датчиками

Таблица 1

Коэффициент затухания рэлеевской волны для каждого образца

№ образца	α_1, Нп/мм	α_2, Нп/мм	№ образца	α_1, Нп/мм	α_2, Нп/мм
2	0.023±0.001	0.027±0.001	12	0.0315±0.0016	0.0376±0.0015
4	0.02319±0.00254	0.02590±0.00248	13	0.0514±0.0027	0.0722±0.0024
5	0.02431±0.00055	0.027±0.001	15	0.0204±0.0004	0.0225±0.0004
6	0.0421±0.0024	0.0524±0.0015	16	0.028±0.001	0.0318±0.0008
7	0.05015±0.00593	0.06968±0.00836	17	0.03648±0.00218	0.0449±0.0021
8	0.0381±0.0011	0.0460±0.0008	18	0.037±0.001	0.0434±0.0008
11	0.0302±0.0013	0.0356±0.0018	19	0.0168±0.0004	0.0183±0.0004

В таблице 1 представлены результаты измерений значения коэффициента затухания, полученные при аппроксимации экспериментальных данных экспоненциальным затуханием α_1, и касательной к начальному участку кривой экспоненциального спада α_2.

Полученные данные в дальнейшем будут использованы при анализе влияния внедренного водорода на акустические свойства титанового сплава ВТ6.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Викторов. И. А./ Звуковые поверхностные волны в твердых делах.// М.: наука, 1981. -с. 3.
2. И.П. Чернов, Ю.П. Черданцев, А.М. Лидер, Г.В. Гаранин./ Физические свойства насыщенных водородом металлов и сплавов.// Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2009. -с. 186.
3. Г. В. Гаранин, В. В. Ларионов, А. М. Лидер / Установка для определения содержания водорода в металлах ультразвуковым методом // Приборы и техника эксперимента / Российская академия наук. — 2013. — № 1. — С. 144-145

ВЛИЯНИЕ ПОДСЛОЯ УГЛЕРОДА И ТИТАНА НА ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПЛЕНКИ НИТРИДА АЛЮМИНИЯ НА КРЕМНИИ

Инь Шаньшань, С.К. Павлов, Ван Цайлунь
Научный руководитель: профессор ТПУ, д.ф.-м.н. Н.Н. Никитенков
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050
E-mail: physhan@yandex.ru

INFLUENCE OF THE CARBON AND THE TITANIUM SUBLAYERS ON THE ELETROPHYSICAL PREPORTIES OF THE THIN FILM SYSTEM ALN/SI

Yin Shanshan, S.K. Pavlov, Wang Cailun
Scientific Supervisor: Prof. TPU, Dr. N.N. Nikitenkov
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin Street, 30, 634050
E-mail: physhan@yandex.ru

Abstract. *The carbon (C) and titanium (Ti) ions were implanted onto the surface of the silicon (Si), and the thin films of aluminum nitride (AlN) were prepared on Si(100) substrate by magnetron sputtering after the implantations. The compositions of these thin film systems were studied by optical microscopy and Raman spectroscopy, and the surface conductivity of those samples were measured. It was indicated that the implanted C and Ti ions did have made a difference to the electro physical properties of the systems AlN/Si.*

Введение. Во многих ситуациях водород является нежелательным загрязнителем, который очень легко воспламеняется в воздухе с нижнего предела воспламеняемости 4,65%. Поэтому обнаружение утечки водорода является чрезвычайно важным. Современные коммерческие детекторы водорода не подходят для широкого применения, в частности, в транспорте, потому что они слишком громоздки, дороги, и некоторые из них опасны. Следовательно, является актуальной разработка новых датчиков водорода, работающих вблизи комнатной температуры.

Благодаря их малым размерам, низкой стоимости и высокой совместимости с микроэлектронной обработкой, нитриды полупроводников в группах II-V были широко исследованы для удовлетворения требованиям обнаружения водорода. Среди различных видов нитридных материалов одним из перспективных материалов для детектирования водорода является AlN, у которого много преимуществ, включая широкую запрещенную зону, высокая устойчивость к электрическому пробою, а также высокие термическая и химическая стабильности.

Характеристики пленок AlN значительно зависит от качества их структуры. Различные подложки были использованы в попытках получения быстрого и качественного выращивания пленок, чаще всего, использовались следующие материалы: Al_2O_3, SiC, Si (111) и Si (100). Среди них, подложка Si (100) привлекала наибольший интерес в связи с возможностью интеграции с современной технологией Si-устройств для различных функций. Например, детектирование ультрафиолетового излучения и Si-микросхем. Кроме того, коэффициент теплового расширения покрытия AlN хорошо совпадает с

коэффициентом теплового расширения подложки Si (100), которая имеет высокую химическую стойкость, соответственно, датчик со слоем AlN станет более стабильным.

Материалы и методы исследования. Для изготовления образцов использовались технологические пластины кремния диаметром 75 мм для приготовления больших и сверхбольших интегральных схем. Марка кремния КЭФ (100). Одна из поверхностей пластин обработана до зеркального, другая до матового блеска. Приготовили 2 пластины кремния: образцы 1 и 2. Образец 2 был разрезан на две части, часть Б используется как исходный кремний. На зеркальную поверхность образца 1 и часть А образца 2 имплантированы титаном и углеродом соответственно. На рис. 1 представлены схемы образцов кремния.

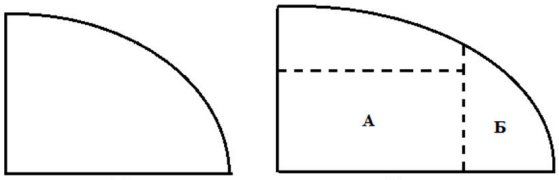


Рис. 1. Схема образцов кремния, здесь зеркальные стороны вверх. (а) образец 1 с имплантацией титаном, (б) образец 2, часть А которого имплантирована углеродом.

Вакуумная плазменно-иммерсионная ионная имплантация (ПИИИ) титана в зеркальные поверхности образцов 1 проведена на установке «Радуга-спектр» кафедры ОФ ФТИ ТПУ. Имплантирован титан с использованием источника ионов титанов на основе импульсно-периодической вакуумной дуги. Имплантация производилась при предельном давлении 10^{-5} Па, и рабочее давление (после напуска аргона) - 10^{-1} Па. Ток дуги является 100 А, максимальное напряжение 1.5 кВ, имплантация продолжает 5 мин.

Имплантация углерода осуществлялась на ускорителе «ТЕМП-4М» лаборатории №1 ИФВТ ТПУ. Ускоряющее напряжение составляло порядка 220-250 кВ, длительность импульса 100 нс на полувысоте ускоряющего напряжения, состав пучка <15% H^+, >85% C^+ (предполагается что вклад многозарядных ионов незначительный), давление в камере порядка 10^{-2} Па, число импульсов – 200 импульсов, плотность энергии на мишени за импульс – 0,2 Дж/см^2 (определена тепловизионной диагностикой), расчетная имплантированная доза ≈ 10^{15}см$^{-2}$.

На все образцы (образец 1, часть А образца 2, часть Б образца 2) были нанесены покрытия нитрид алюминий AlN в лаборатории №23 кафедры ЭФ ФТИ ТПУ. Параметры напыления следующие: предельное давление в камере магнетрона 3×10^{-3} Па, рабочее давление $1{,}4\times10^{-1}$ Па, поток аргона для поддержания магнетронного разряда – 15,2 ст. см^3/мин, поток азота – 13,5 ст. см^3/мин. Напряжение напыления в максимуме – 630 В, ток – 2,8 А, частота импульсов – 100 кГц, коэффициент заполнения – 80%. Напыление продолжалось 30 минут. Перед напылением чистка ионным источником (напряжение: 2500 Вольт, 30 мА).

Выполнены следующие измерения: проанализирован составов поверхности методами оптической микроскопии и Рамановский спектрометрии на образцах кремния до и после имплантации (углерода или титана), а также после нанесения покрытия нитрида алюминия. Измерены вольт-амперные характеристики (ВАХ) путем приложения напряжения и регистрации соответствующего тока для тех образцов же, что и рамановская спектрометрия. Снятие ВАХ для исходного образца при низком значении напряжения не проводилось ввиду высокого поверхностного сопротивления образца.

Результаты и обсуждение. Измерение ВАХ были проведены после каждого этапа получения рабочих структур. На рис. 2 показаны ВАХ и поверхностная проводимость для трех образцов после нанесения покрытия AlN.

Из рис.2, видно что, полученные значения поверхностной проводимости для всех трех подложек с покрытиями равны $(3-7)\cdot 10^{-7}$ См. После нанесения покрытия, проводимость пластины с имплантацией титана (образец 1 - Si+Ti+AlN) больше проводимости пластины с имплантацией углерода (А образца

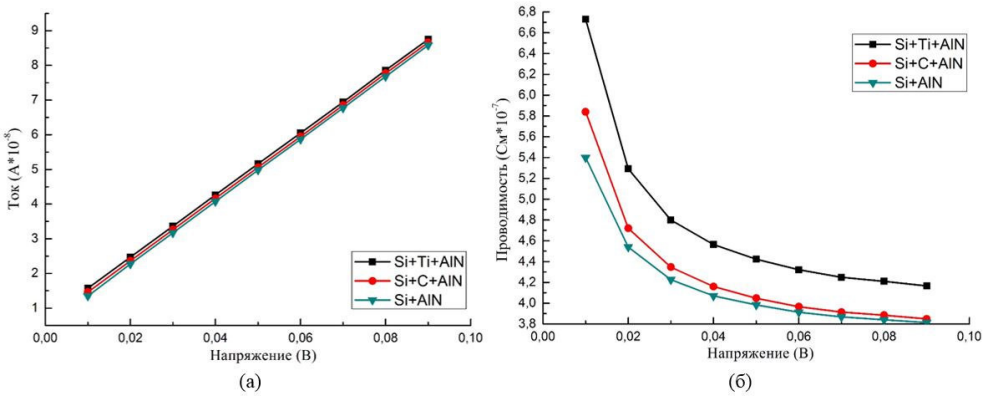


Рис. 2. а) ВАХ всех образцов с покрытиями нитрида алюминий (AlN). б) Поверхностная электропроводность образцов с покрытиями нитрида алюминий (AlN).

2 - Si+C+AlN), больше проводимости пластины исходного кремния (Б образца 2 - Si+AlN).

Рис. 3 показывает вольтамперную характеристику для: а) образца 1 и б) части А образца 2 соответственно. Отсюда, видно, что имплантации углерода и титана влияют на электрофизические свойства пластины кремния, то есть увеличивают поверхностную проводимость исходного кремния. После нанесения покрытия AlN, проводимость пластины ещё выше чем проводимости пластины без покрытий, и проводимость пластины с имплантацией титана больше проводимости пластины с

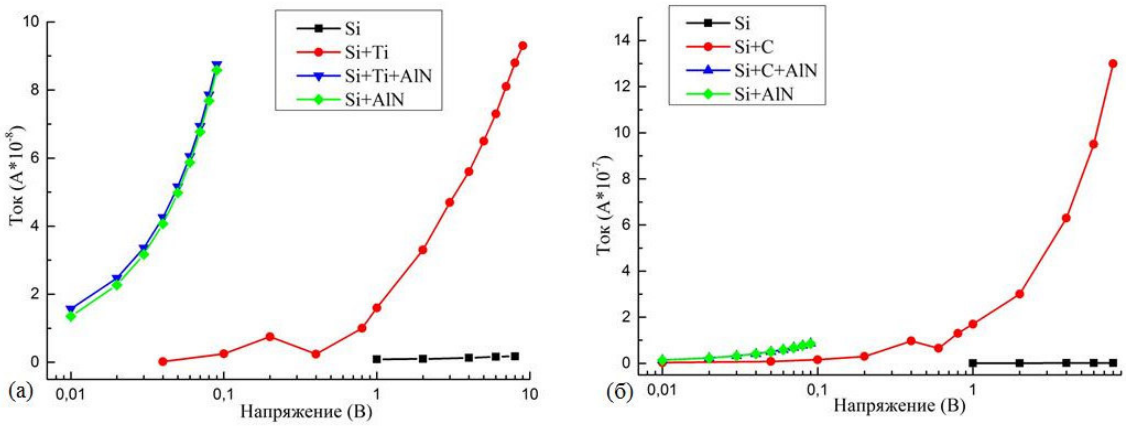


Рис. 3. Вольт-амперная характеристика для а) образца 1 и б) части А образца 2 соответственно.

имплантацией углерода.

Выводы. Предварительная (перед нанесением пленок AlN) имплантация ионов титана или углерода увеличивает поверхностную проводимость системы AlN/Si. Системы с подслоем титана имеет существенно более крутую вольтамперную характеристику, чем системы с подслоем углерода и без подслоя.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СВЕРХЗВУКОВЫХ СТРУЙ С ПОВЕРХНОСТЬЮ МЕСТА ПОСАДКИ ПЛАТФОРМЫ «ЭКЗОМАРС»

А.М. Кагенов, К.В. Костюшин, И.В. Еремин

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

Национальный исследовательский Томский государственный университет,

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

E-mail: anuar@ftf.tsu.ru

MATHEMATICAL MODELING OF PLUMES IMPINGEMENT ON LANDING SITE OF "EXOMARS" LANDING PLATFORM

A.M. Kagenov, K.V. Kostyushin, I.V. Eremin

Scientific Supervisor: Prof., Dr. A.A. Glazunov

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

E-mail: anuar@ftf.tsu.ru

Abstract. *In the present study the results of mathematical modeling of impingement plumes with landing site of "ExoMars" landing platform are shown. The gas-dynamic parameters while landing platform impingement plumes with surface of Mars were obtained at an altitude of 1; 0,5; 0,3 meter. The thrust at this altitude of four thrusters was set to 7648 N and 54936 N. These results allow further evaluation of thermal and power loads occur on the surfaces of the landing platform and the Martian surface as the result of the impingement of a thruster plume on surface.*

Введение. Одной из приоритетных задач в изучении планет Солнечной системы является исследование Марса. Это обусловлено тем, что Марс относительно других планет имеет наиболее близкие к Земле физические характеристики. В настоящее время исследование Марса осуществляется с использованием искусственных спутников, выведенных на его орбиту, посадочных платформ и марсоходов доставленных на поверхность планеты. Развитие марсианских программ берет начало с 1960 годов [1], когда был запущен ряд космических аппаратов к планете Марс. На данный момент разработано 47 космических программ, среди которых состоялось менее половины (21 миссия). Наибольший интерес, с точки зрения отработки схем посадки, представляют следующие: Viking 1, Viking 2, Pathfinder, Spirit, Opportunity, Phoenix и Curiosity. В продолжение этих марсианских программ в настоящее время реализуется совместный проект «ЭкзоМарс» между Федеральным космическим агентством (Роскосмос) и Европейским космическим агентством (ЕКА). Данный проект состоит из двух этапов. В 2016 году стартовал первый этап программы «ЭкзоМарс», включающий в себя спутник TGO (Trace Gas Orbiter) с научной аппаратурой и спускаемый модуль. Задачи спускаемого модуля ЕКА Schiaparelli заключались в отработке методики мягкой посадки. Однако из-за ошибок в работе бортового компьютера Schiaparelli разбился об поверхность Марса. Второй этап программы «ЭкзоМарс» изначально был запланирован на 2018 год. В связи с некоторыми трудностями разработка второго этапа была продлена на два года. Пуск к планете Марс российского десантного модуля «ЭкзоМарс» с европейским ровером запланирован на 2020 год. Особой интерес представляет теоретическая отработка процесса мягкой посадки посадочной платформы на поверхность Марса. Это связано с возможностью

появления различных негативных эффектов (пыль, lift loss, тепловые и силовые нагрузки) влияющих на корректную работу датчиков, бортовых систем и полезной нагрузки. Поэтому необходима разработка вычислительного комплекса для проведения математического моделирования процесса посадки космических аппаратов на тела Солнечной системы.

Физико-математическая постановка. Десантный модуль, прорабатываемый НПО им. С. А. Лавочкина в укрепленном виде состоит из: корпуса, парашютной системы, радара и другого оборудования [2]. На конечном этапе спуск и посадка посадочного модуля (ПсМ) осуществляется за счет работы 4-х сопловой двигательной установки (ДУ), сопла тормозных двигателей которой направлены к поверхности места посадки. Тяга одного тормозного двигателя ДУ может изменяться в широком диапазоне от 1912 до 13734 Н [3]. Газодинамические и тепловые нагрузки на ПсМ и на место посадки существенно зависят от сложной изменяющейся по времени газодинамической картины течения. Она формируется за счет одновременного истечения струй из сопел двигательной установки, которые взаимодействуют между собой, поверхностью места посадки и разреженной атмосферой Марса. Для математического моделирования процессов взаимодействия сверхзвуковых струй с поверхностью места посадки платформы «ЭкзоМарс» разработан вычислительный комплекс, основанный на базе исходного кода программы OpenFOAM.

Методика расчета основана на решении осредненных уравнений Навь-Стокса по Рейнольдсу совместно с уравнениями двухпараметрической модели турбулентности $SST\ k\text{-}w$ для вязкого идеального газа [4-6]. Интегрирование дифференциальных уравнений в частных производных проводится методом контрольных объемов, потоки через грани ячеек находятся из приближенного решения задачи Римана по схеме HLLC с использованием разностной схемы MUSCL типа TVD второго порядка точности [7]. СЛАУ разрешается методом Гаусса. Дискретизация по времени осуществляется четырех шаговым методом Рунге-Кутта второго порядка точности с коэффициентами: $a_1 = 0{,}11$; $a_2 = 0{,}2766$; $a_3 = 0{,}5$; $a_4 = 1$ [8]. Математическое моделирование выполнено с использованием суперкомпьютера Томского государственного университета СКИФ Cyberia.

Результаты математического моделирования. Проведены параметрические численные исследования в пространственной поставке для упрощенной конфигурации ПсМ «ЭкзоМарс» в условиях Марса. За параметры окружающей среды принималось давление 650 Па, температура 250 К. Место посадки учитывает особенности поверхности Марса. Высота расположения ПсМ над местом посадки изменялась от 1 м до 0,3 м. Тяга ДУ на этих высотах соответствовала 7648 Н и 54936 Н. Время работы ДУ составляло 0,3 секунды. Получено, что при расположении ПсМ на высоте более 1 м влиянием струй ДУ на поверхности ПсМ и Марса незначительны. Максимальные градиенты параметров газа возникают на высоте 0,3 м. Для этой высоты на рисунке 1 и 2 показано распределение чисел Маха в двух перекрестных сечениях проходящих через оси симметрии сопел.

При расположении ПсМ на высоте 1 м и работе ДУ с тягой 7648 Н у поверхности места посадки реализуется давление порядка 5 кПа и температура около 600 К. При снижении ПсМ с высоты 1 м до 0,3 м давление и температура возрастают до значений параметров торможения. При работе ДУ с тягой 54936 Н на высоте 1 м давление и температура у поверхности Марса принимают значения порядка 50 кПа и 1200 К, а на высоте 0,3 м достигают значений параметров торможения.

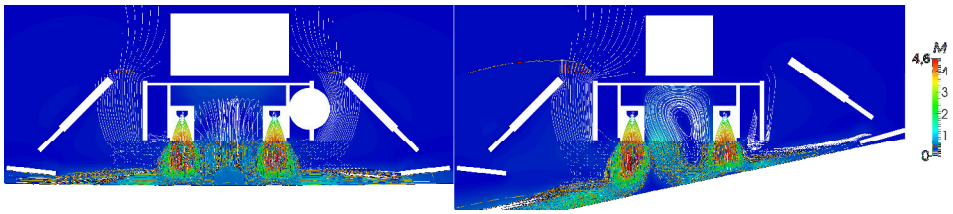


Рис. 1. Распределение числа Маха при работе ДУ с тягой 7648 Н на высоте 0,3 метра

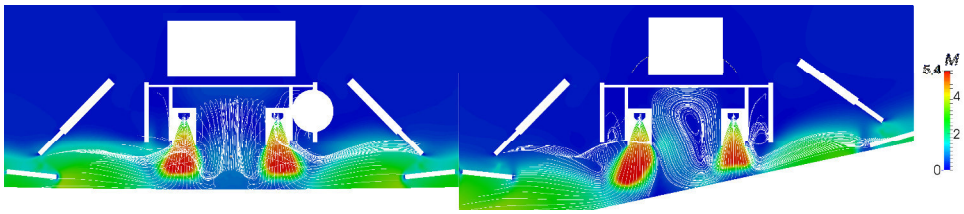


Рис. 2. Распределение числа Маха при работе ДУ с тягой 54936 Н на высоте 0,3 метра

Заключение. Разработан вычислительный комплекс, основанный на базе исходного кода программы OpenFOAM. Проведены параметрические исследования упрощенной конфигурации посадочной платформы «ЭкзоМарс». Получены распределения газодинамических параметров при снижении посадочного модуля с высоты 1 м до 0,3 м при работе двигательной установки с тягой 7648 Н и 54936 Н. Данные результаты являются основой для дальнейших расчетов тепловых и силовых нагрузок возникающих на поверхностях посадочной платформы и Марса в результате работы двигательной установки.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках государственного задания, проект № 9.9063.2017/БЧ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Mars Exploration Program. Официальный сайт NASA: National Aeronautics and Space Administration [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://mars.nasa.gov. – 27.02.17.
2. Хартов В.В., Мартынов М.Б., Лукьянчиков А.В., Алексашкин С.Н. Проектная концепция десантного модуля «ЭкзоМарс-2018» создаваемого НПО им. С.А. Лавочкина // Вестник ФГУП НПО им. С.А. Лавочкина. – 2014. – № 2 (23). – С. 5-12.
3. Александров Л.Г., Морозов В.И., Степанов С.С., Крылов А.А., Кузьмин О.А., Федотов А.В., Мальцев М.В. Двигательная установка посадочной платформы десантного модуля // Вестник ФГУП НПО им. С.А. Лавочкина. – 2014. – № 2 (23). – С. 116-120.
4. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. – М.: Дрофа, 2003. – 840 с.
5. Дулов В.Г. Газодинамика процессов истечения. – Новосибирск: Наука, 1984 – 226 с.
6. Menter F.R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications // AIAA Journal. 1994. – V. 32. – No 8. – P. 1598-1605.
7. Toro E.F. Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics. – Berlin: Springer-Verlag, 2009. – 724 p.
8. Lallemand M.-H., Steve H., Dervieux A. Unstructured mulitgridding by volume agglomeration: Current status. Computers and Fluids, 1992. – V. 21, I. 3, – P. 397-433.

ИССЛЕДОВАНИЕ КЛИНИЧЕСКОЙ ПРИМЕНИМОСТИ ПЛОСКОПАРАЛЛЕЛЬНОЙ ИОНИЗАЦИОННОЙ КАМЕРЫ PPC40 ДЛЯ ОРТОВОЛЬТНОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

С.А. Кадочникова, А.А. Баулин, 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: s.kadochnikova07@gmail.com

THE RESEARCH OF CLINICAL APPLICABILITY OF THE PARALLEL-PLATE IONIZATION CHAMBERS PPC40 FOR ORTHOVOLTAGE X-RAYS

S.A. Kadochnikova, A.A. Baulin, E.S. Sukhikh
Scientific Supervisor: assistant professor, PhD, E.S. Sukhikh
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050
E-mail: s.kadochnikova07@gmail.com

Abstract. *In clinical dosimetry ionization chambers are the "gold standard" in the measurement of absorbed dose. The most popular use received cylindrical and parallel-plate chambers, which are not only geometric shape, but also the measuring range of ionizing radiation energy. In the present study, it was investigated the possibility of using a plane-parallel ionization chamber PPC40 for orthovoltage X-rays. To achieve this goal, we measured the depth distribution of the absorbed dose in a water phantom.*

Введение. Согласно международным протоколам [1,2] в клинической дозиметрии ионизационные камеры являются «золотым стандартом» в измерении поглощённой дозы в воздухе и в воде. Наибольшую популярность в использовании получили цилиндрические (считается вторым эталоном дозиметрии) и плоскопараллельные камеры, которые отличаются не только геометрической формой, но и измеряемым диапазоном энергий ионизирующего излучения. Главным преимуществом плоскопараллельной камеры перед цилиндрической является высокая точность измерения поглощенной дозы в приповерхностных слоях материала. Согласно международным протоколам для дозиметрии высокоэнергичных электронных и фотонных пучков все ионизационные камеры, как цилиндрические, так и плоскопараллельные, калибруются на радионуклидном источнике ^{60}Co со средней энергией гамма излучения 1,25 МэВ. А для дозиметрии рентгеновского излучения, калибровка камер происходит на определённых напряжениях рентгеновской трубки, и калибровочные коэффициенты для промежуточных напряжений трубки находятся из зависимости полученных коэффициентов от напряжения.

Измерения поглощенной дозы в приповерхностных слоях важны при облучении клеточных структур, слой которых в чаше Петри не более 2мм. Эти исследования необходимы для введения в практику фотон-захватной терапии – лучевой терапии злокачественных опухолей с использованием клинических источников фотонов в присутствии дозодополняющих агентов в опухоли. Дозодополняющий агент – частицы любого химического элемента с высоким атомным числом, например, платины, золота и других элементов.

Целью данной работы является подтверждение возможности применимости плоскопараллельной камеры, предназначенной для дозиметрии электронных пучков с энергиями 2-50 МэВ, для ортовольтного рентгеновского излучения.

Материалы и методы исследования. Для подтверждения гипотезы были проведены эксперименты по глубинному распределению дозы внутри водного фантома. В работе использовались две ионизационные камеры: цилиндрическая камера FC65-G с энергетическим диапазоном энергий рентгеновского излучения 70-280 кэВ и фотонного 50-250 МэВ [3] и плоскопараллельная камера PPC40 (Рис.1.) с энергетическим диапазоном энергий электронных пучков выше 2 МэВ [4].

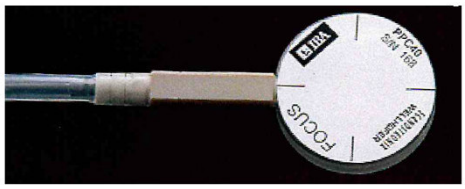


Рис. 1. Плоскопараллельная ионизационная камера PPC40.

Измерения проводились в водном фантоме для обеих камер при одинаковом расстоянии источник-поверхность (РИП) и для всех возможных размеров полей. Ионизационные камеры облучались при напряжениях: 100, 120, 150, 180, 200, 250, 300 кВ.

Первым этапом эксперимента является проверка калибровочного коэффициента N_{D,w,Q_0}, указанного в сертификате камеры. Для этого были проведены измерения глубинных распределений дозы в водном фантоме с плоскопараллельной (PPC40) и с цилиндрической (FC65-G) камерами на гамма-терапевтическом аппарате TheratronEquinox 100 с радиоактивным источником ^{60}Co. Геометрия эксперимента следующая: (РИП) – 100 см; поле – квадрат со стороной 10 см; глубина, на которой находится камера в водном фантоме – 10 см. Также в ходе этого этапа были проверены поправочные коэффициенты p_{pol} и p_{ion} для обеих камер.

Вторым этапом является перекрестная калибровка плоскопараллельной камеры PPC40 относительно референсной камеры FC65-G для рентгеновского излучения 100-300 кэВ. Для получения результата была проведена серия измерений глубинных распределений доз в водном фантоме для обеих камер на рентгенотерапевтической системе Xstrahl 300 (Рис.2) при напряжениях 100-300 кэВ и для всех полей.

Рис. 2. Рентгенотерапевтическая система Xstrahl 300.

Эти измерения необходимы, чтобы определить калибровочный коэффициент $N_{D,w,Q}^{field}$ для плоскопараллельной камеры PPC40, который зависит от размеров поля и от напряжения трубки, и определяется по формуле:

$$N_{D,w,Q}^{field} = \frac{M_{ref}}{M_{field}} * N_{D,w,Q_0}^{ref},$$

где M_{ref} – скорректированные значения заряда для опорной камеры (Кл); M_{field} – скорректированные значения заряда для калибруемой камеры (Кл); N_{D,w,Q_0}^{ref} – калибровочный коэффициент для опорной камеры, полученный при калибровке на пучке фотонов от источника ^{60}Co.

Зная калибровочные коэффициенты $N_{D,w,Q}^{field}$ и N_{D,w,Q_0}, можно найти корректирующий коэффициент на качество пучка k_Q по формуле:

$$k_Q = \frac{N_{D,w,Q}^{field}}{N_{D,w,Q_0}^{ref}}.$$

После проведения эксперимента и обработки полученных данных было произведено моделирование глубинного распределения дозы внутри фантома в программе PCLab для сравнения с результатами измерений. Данная программа предназначена для моделирования методом Монте-Карло процессов распространения электронов, позитронов, фотонов и протонов в веществе, визуализация этих процессов распространения на экране дисплея и получение численных результатов взаимодействия.

Результаты. Были построены сравнительные графики зависимости коэффициентов качества пучка, полученных в результате моделирования и в результате измерений, от напряжения рентгеновской трубки и от размера поля. Анализируя данные графики, можно сделать вывод, что смоделированные и измеренные значения отличаются менее, чем на 3%.

Заключение. На основе результатов исследования можно сделать вывод о том, что в клинической дозиметрии ортовольтного рентгеновского излучения помимо цилиндрической камеры, рекомендованной международными протоколами, возможно применение плоскопараллельной ионизационной камеры PPC40.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. МАГТЭ Определение поглощенной дозы при дистанционной лучевой терапии: международные практические рекомендации по дозиметрии, основанные на эталонах единицы поглощенной дозы в воде // Серия технических докладов №398. – Вена, 2004.
2. AAPM protocol for 40–300 kV x-ray beam dosimetry in radiotherapy and radiobiology/C.-M. Ma, C.W. Coffey, L.A.DeWerd et al.//Medical Physics. — 2001. — Vol. 28, no. 6. — Pp. 868–893.
3. User’s Guide: «The Farmer Type Chamber FC65-G». – Scanditronix, 2008.
4. User’s Guide: «The Parallel Plate Chamber PPC40». – Scanditronix, 2007.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ЦИНК- И МЕДЬ-СОДЕРЖАЩИХ КАЛЬЦИЙФОСФАТНЫХ ПОКРЫТИЙ

А.А. Казакбаева[1], Е.Г. Комарова[2]

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. Ю.П. Шаркеев[2]

[1]Национальный исследовательский 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: aigerim_@bk.ru

INVESTIGATION OF ZINC- AND COPPER-INCORPORATED CALCIUM PHOSPHATE COATING STRUCTURE

A.A. Kazakbaeva[1], E.G. Komarova[2]

Scientific Supervisor: Prof., Dr. Yu.P. Sharkeev[2]

[1]Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050

[2]Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Russia, Tomsk, 2/4 Academicheskii pr., 634055

E-mail: aigerim_@bk.ru

***Abstract**. The investigation of the structure of zinc- or – copper-incorporated calcium phosphate coatings on the titanium deposited by the micro arc oxidation method under different process voltages has been performed. The increase of the process voltage leads to the growth of thickness and pores and formation of macro pores.*

Введение. Для решения проблемы адаптации металлических имплантатов в организме человека применяются различные методы нанесения кальцийфосфатных (КФ) покрытий. В последние годы наиболее активно развивается методом микродугового оксидирования (МДО) для нанесения покрытий. Данный метод представляет интерес благодаря свойствам получаемых покрытий, таких как коррозионная стойкость, механическая прочность, развитая поверхность, пористость и др. Изменяя состав и концентрацию электролита можно вводить в состав покрытий, не только фосфаты кальция, но и другие соединения. В частности, ионы цинка (Zn^{2+}) и меди (Cu^{2+}), обладающие сильным противомикробным действием на различные бактерии [1], могут придавать покрытиям антибактериальные свойства. Чтобы понять механизмы поведения и растворения покрытий в биологической среде необходимо знание их структурных свойств. **Целью работы** было изучение структуры Zn- и Cu-содержащих КФ покрытий методом растровой электронной микроскопии (РЭМ).

Материалы и методы. В эксперименте использовались образцы – пластины из технически чистого титана ВТ1-0 размером 10×10×1 мм^3. МДО образцов проводилось на установке MicroArc–3.0 с импульсным источником питания в анодном режиме [2]. Электролит содержал ортофосфорную кислоту (30% раствор), карбонат кальция (100 г/л) и механохимически синтезированный Zn- или Cu-замещенный ГА (60 г/л) с количеством заместителя 0,1 моль ($Ca_{9.9}Zn_{0.1}(PO_4)_6(OH)_2$ и $Ca_{9.9}Cu_{0.1}(PO_4)_6(OH)_2$) [3]. Нанесение покрытий проводили при следующих параметрах: длительность импульсов – 100 мкс, частота импульсов – 50 Гц, длительность процесса – 10 мин, напряжение процесса варьировали в интервале 200-300 В. Структуру покрытий исследовали методом РЭМ на электронном микроскопе Zeiss LEO EVO 50. Для измерения размеров структурных элементов покрытий применяли метод «секущей» [2].

Результаты и обсуждения. Исследования методом РЭМ поперечных изломов покрытий показали, что Zn-содержащие (Zn-КФ) и Cu-содержащие (Cu-КФ) покрытия имеют пористую структуру (рис. 1 и 2). Многочисленные поры распределены однородно по толщине покрытий. Структурные элементы (сферолиты со сквозными порами) формируются только на поверхности покрытий. На РЭМ-изображениях видно, что Zn-КФ и Cu-КФ покрытия имеет одинаковую толщину, которая с повышением напряжения процесса растет от 45 до 110 мкм, как это было показано в работе [4]. При этом с ростом толщины увеличиваются размеры пор в структуре покрытий так же, как и размеры структурных элементов на поверхности, как это было показано в работе [4]. Увеличение толщины покрытий и размера пор обычно сопровождается ростом внутренних механических напряжений [2]. В результате чего, изменяется механизм излома покрытия, и образование трещин происходит по порам, межслойным границам и контактным поверхностям частиц, как это видно на РЭМ-изображениях покрытий (рис. 1 *а, в* и 2 *а, в*). Измерение размеров пор методом «секущей» [2] и последующая статистическая обработка данных с использованием метода наименьших квадратов показали, что для покрытий, нанесенных при напряжении 200 В, гистограммы имеют нормальное уномодальное распределение пор по размерам (рис. 1 *б* и 2 *б*). Видно, что в Zn-КФ и Cu-КФ покрытиях формируются поры с размерами в интервале 1–13 мкм. При этом средний размер пор составляет ~ 4 мкм (рис. 1 *б* и 2 *б*).

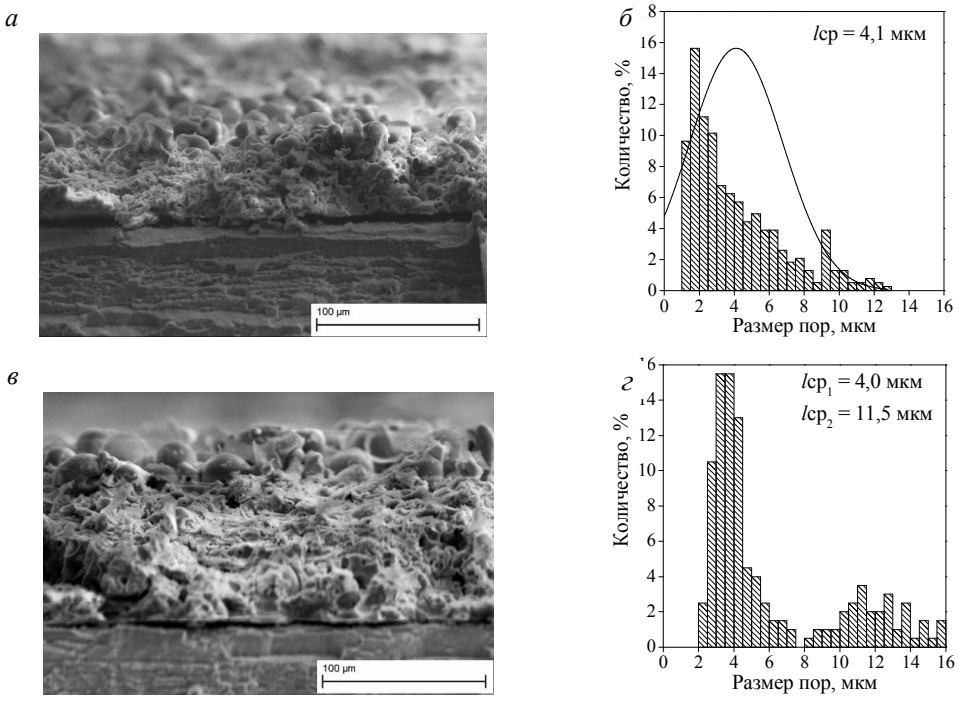


Рис. 1. РЭМ- изображения поперечного излома (а, в) и гистограммы распределения микропор (б, г) Zn-КФ покрытиях, нанесенных при напряжениях процесса (В): 200 (а, б) и 300 (в, г)

Повышение напряжения до 300 В приводит к увеличению размеров пор в Zn-КФ и Cu-КФ покрытиях в интервале 2–16 мкм. При этом гистограммы распределения пор по размерам приобретают бимодальный характер (рис. 1 *г* и 2 *г*). Средний размер пор составляет 4,0 и 11,5 мкм в Zn-КФ покрытиях, и 4,5 и 11,8 мкм в Cu-КФ покрытиях. В структуре данных покрытий наряду с порами размером 1–16 мкм наблюдаются и *макропоры* размером 15–30 мкм. Это обусловлено тем, что с повышением напряжения процесса происходит увеличение интенсивности микродуговых разрядов и, следовательно,

увеличиваются размеры каналов, образующих поры. *Макропоры* образуются в результате интенсивного воздействия «каскада» микродуговых разрядов в одном и том же месте протяженностью в несколько миллисекунд [2]. В то время как длительность локальных микроразрядов составляет 100 мкс.

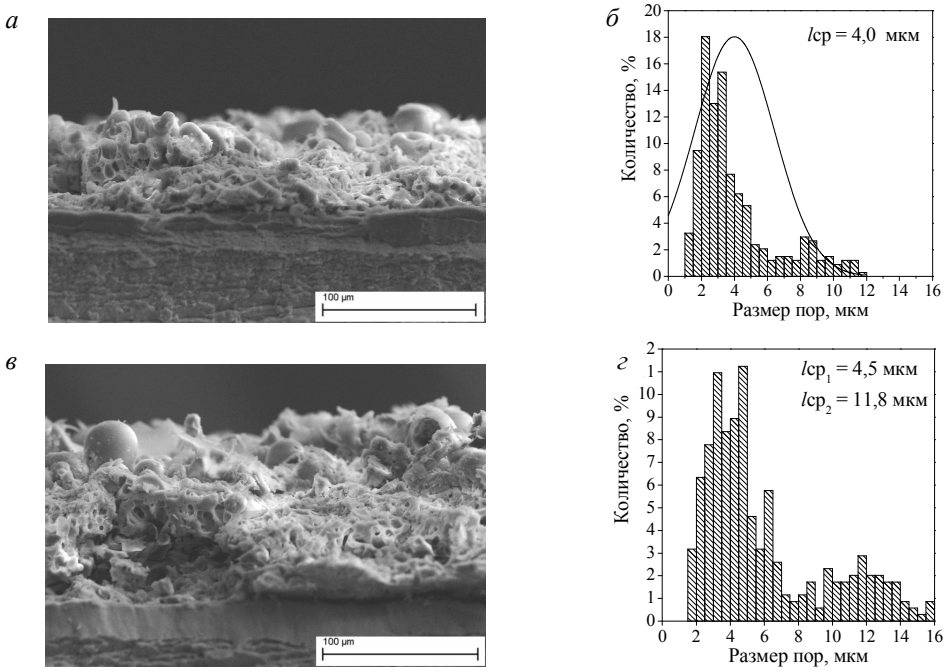


Рис. 2. РЭМ- изображения поперечного излома (а, в) и гистограммы распределения пор (б, г) в Cu-КФ покрытиях, нанесенных при напряжениях процесса (В): 200 (а,в) и 300 (б,г)

Таким образом, показано, что микродуговые Zn-КФ и Cu-КФ покрытия характеризуются однородной пористой структурой с размерами пор 1–16 мкм и наличием на поверхности структурных элементов – сферолитов. С повышением напряжения процесса от 200 до 300 В происходит рост толщины покрытий и увеличение размеров структурных элементов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lowe N.M., Fraser W.D., Jackson M.J. Is there a potential therapeutic value of copper and zinc for osteoporosis? // Proceedings of the Nutrition Society. – 2002. – No. 61. – P. 181–485.
2. Шаркеев Ю.П., Псахье С.Г., Легостаева Е.В., Князева А.Г., Смолин А.Ю. и др. Биокомпозиты на основе кальцийфосфатных покрытий, наноструктурных и ультрамелкозернистых биоинертных металлов, их биосовместимость и биодеградация. Томск: Издательский Дом Томского государственного университета. – 2014. – 596 с.
3. Chaikina M.V., Bulina N.V., Ishchenko A.V., Prosanov I.Yu. Mechanochemical synthesis of SiO_4^{4-}-substituted hydroxyapatite, part I – kinetics of interaction between the components // European Journal of Inorganic Chemistry. – 2014. – V. 2014. – P. 4803–4809.
4. Казакбаева А.А., Комарова Е.Г., Седельникова М.Б., Шаркеев Ю.П. Исследование морфологии и рельефа поверхности Zn- или Cu-содержащих кальцийфосфатных покрытий // Материалы VI Всероссийской конференции молодых ученых «Материаловедение, технологии и экология в третьем тысячелетии». Томск: Издательство ИОА СО РАН, 2016. – С. 51–55.

ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ И СОСТАВА МИКРОДУГОВЫХ ЛАНТАН-КРЕМНИЙ-СОДЕРЖАЩИХ КАЛЬЦИЙФОСФАТНЫХ ПОКРЫТИЙ

Е.А. Казанцева[1], Е.Г. Комарова[2]

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. Ю.П. Шаркеев[2]

[1]Национальный исследовательский 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:kati10_96@mail.ru

STUDY OF STRUCTURE AND COMPOSITION OF MICRO ARC LANTANUM-SILICON-INCORPORATED CALCIUM PHOSPHATE COATINGS

E.A. Kazanceva[1], E.G. Komarova[2]

Scientific Supervisor: Prof., Dr. Yu. P. Sharkeev[2]

[1]Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050

[2]Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Russia, Tomsk, 2/4 Academicheskii pr., 634055

E-mail: kati10_96@mail.ru

Abstract. *The lanthanum- silicon-incorporated calcium phosphate coatings on the titanium have porous X-Ray amorphous structure. The increase of the process voltage leads to the growth of thickness and structural elements and to the formation in the coatings of crystalline phases $CaHPO_4$ and β-$Ca_2P_2O_7$.*

Введение. Для придания металлическим имплантатам биоактивных свойств на поверхность наносят кальцийфосфатные (КФ) покрытия близкие по составу к костной ткани. Метод микродугового оксидирования (МДО) хорошо подходит для модификации и функционализации металлических подложек, обеспечивая эффективный химический барьер против выхода ионов металла и увеличивая коррозионную стойкость поверхности. Модификация КФ покрытий лантаном – элементом, обладающим комплексным антисептическим и антитромбогенным действием, и кремнием – остеотропным микроэлементом, будет способствовать обеспечению сбалансированности биопокрытий и костных структур по концентрации микроэлементов [1]. **Целью работы** было изучение структуры и фазового состава лантан-кремний-содержащих КФ (La-Si-КФ) покрытий, полученных при различных напряжениях процесса МДО.

Материалы и методы исследования. Нанесение КФ покрытий проводили методом МДО на установке MicroArc–3.0 на образцы из технически чистого титана ВТ1-0 размером 10×10×1 мм^3 [2]. В качестве компонентов электролита использовали H_3PO_4 (30%-ный раствор), $CaCO_3$ (100 г/л) и лантан-кремний-замещенный ГА с концентрацией заместителей 0,5 моль ($Ca_{9.5}La_{0.5}(PO_4)_{5.5}(SiO_4)_{0.5}(OH)_2$, 60 г/л) [2, 3]. Нанесение покрытий проводили в анодном режиме при следующих параметрах: длительность импульсов – 100 мкс, частота – 50 Гц, время нанесения покрытий – 10 мин, напряжение варьировалось в диапазоне 150-350 В. Структуру покрытий исследовали методом растровой электронной микроскопии (РЭМ) на электронном микроскопе LEO EVO 50. Для измерения размеров

структурных элементов покрытий применяли стандартный метод «секущей» [2]. Рентгенофазовый анализ (РФА) выполняли на дифрактометре ДРОН-7 в Co Kα-излучении (ЦКП «Нанотех» ИФПМ СО РАН).

Результаты и обсуждения. Исследования методом РЭМ поперечных изломов покрытий показали, что La-Si-КФ покрытия имеют пористую структуру (рис. 1). Многочисленные поры распределены однородно по толщине покрытий. Структурные элементы (сферолиты со сквозными порами) формируются на поверхности покрытий (рис. 2). На РЭМ-изображениях видно, что с повышением напряжения процесса толщина покрытий растет от 45 до 130 мкм, как это было показано в работе [2]. При этом с ростом толщины увеличиваются размеры структурных элементов – сферолитов и пор, как это было показано в работе [2]. Измерение размеров пор в структуре покрытий и последующая статистическая обработка данных с использованием метода наименьших квадратов показали, что для покрытий, нанесенных при напряжении 200 В, гистограмма имеет нормальное уномодальное распределение пор по размерам (рис. 1 *б*). Видно, что в La-Si-КФ покрытиях формируются поры с размерами в интервале 1–13 мкм, а средний размер пор составляет 4,1 мкм.

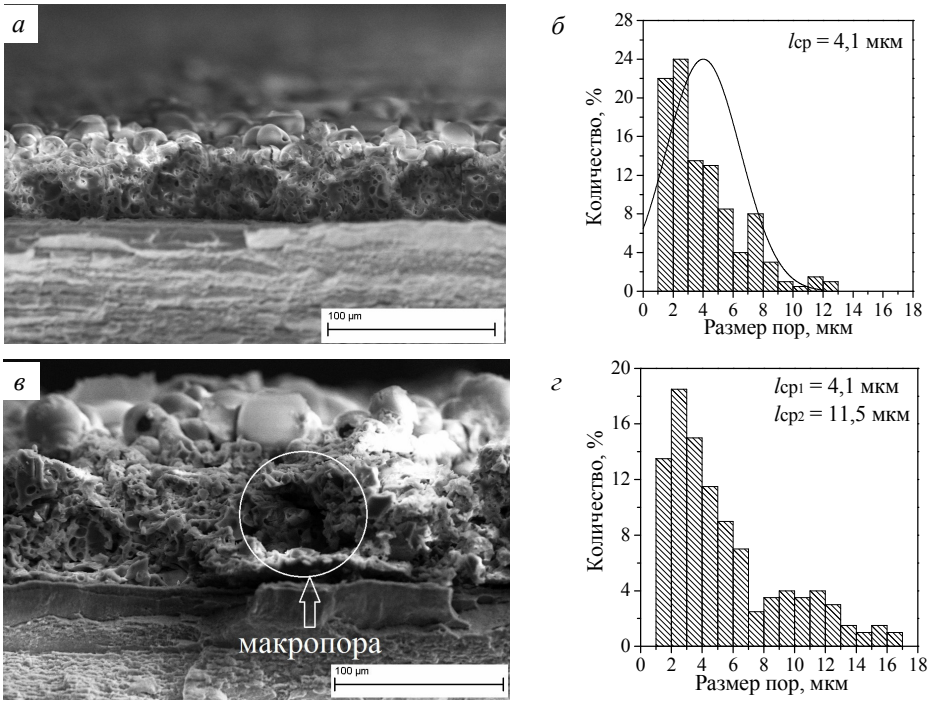


Рис. 1. РЭМ-изображения поперечных изломов (а, в) и гистограммы распределение пор по размерам (б, г) La-Si-КФ покрытий, нанесенных при напряжениях процесса, В: (а, б) – 200; (в, г) – 300

Повышение напряжения до 300 В приводит к увеличению размеров пор в покрытиях в интервале 1–17 мкм. При этом гистограмма распределения пор по размерам приобретает бимодальный характер (рис. 1 *г*). Средний размер пор составляет 4,1 и 11,5 мкм. Также в структуре данных покрытий наряду с порами наблюдаются и *макропоры* размером 15–30 мкм. Это обусловлено тем, что с повышением напряжения процесса происходит увеличение интенсивности микродуговых разрядов и, следовательно, увеличиваются размеры каналов, образующих поры. *Макропоры* образуются в результате интенсивного воздействия «каскада» микродуговых разрядов в одном и том же месте протяженностью в несколько миллисекунд. В то время как длительность локальных микроразрядов составляет 100 мкс.

В La-Si-КФ покрытиях, полученных при напряжениях процесса 300–350 В, на поверхности разрушенных полусфер осколков и образуются кристаллы пластинчатой формы (рис. 2 *б*), что может указывать на формирование новой кристаллической фазы в покрытиях. РФА показал, что La-Si-КФ покрытия, нанесенные при напряжениях процесса 200–250 В, находятся, в основном, в рентгеноаморфном состоянии (рис. 3). При повышении напряжения оксидирования от 300 до 350 В происходит формирование кристаллических фаз монетита $CaHPO_4$ и β-пирофосфата кальция β-$Ca_2P_2O_7$.

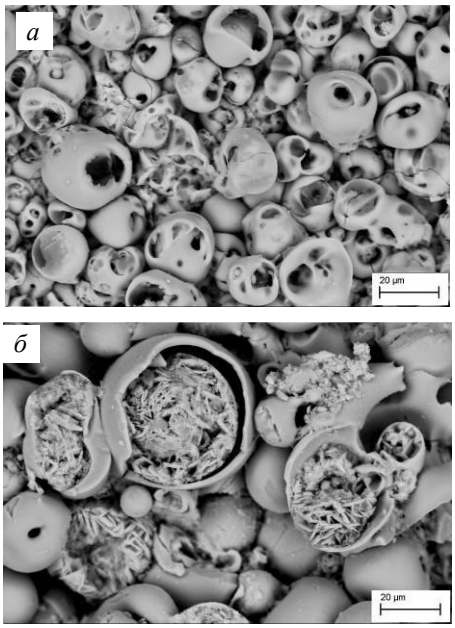


Рис. 2. РЭМ-изображения поверхности La-Si-КФ покрытий, нанесенных при напряжениях процесса (В): 200 (а) и 300 (б)

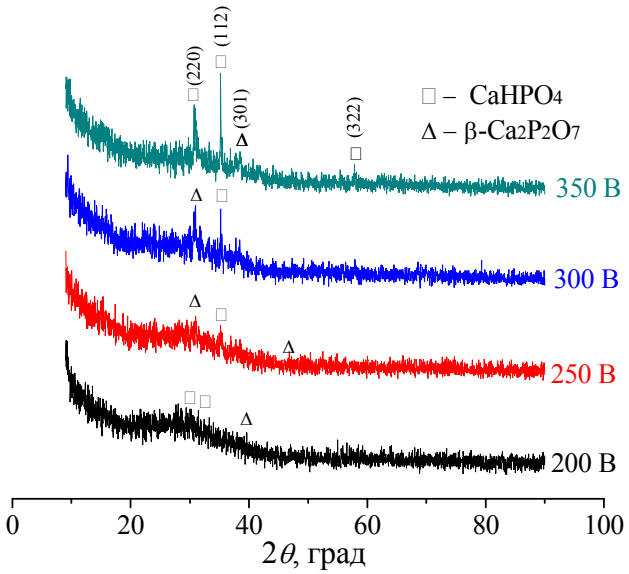


Рис. 3. Рентгенограммы La-Si-КФ покрытий, нанесенных при различных напряжениях процесса

Таким образом, La-Si-КФ покрытия имеют пористую структуру и находятся, в основном, в рентгеноаморфном состоянии. Повышение напряжения процесса приводит к увеличению размеров структурных элементов и формированию в покрытиях кристаллических фаз $CaHPO_4$ и β-$Ca_2P_2O_7$.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы фундаментальных исследований СО РАН на 2013-2016 гг., проект III 23.2.5 и РФФИ, проект №15-03-07659.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Родионов И.В., Бутовский К.Г., Бейдик О.В., Сурменко Е.Л. Оксидные биопокрытия с антисептическими и антитромбогенными свойствами на чрескостных фиксаторах в аппаратах остеосинтеза // Биомедицинская радиоэлектроника. – 2008. – № 8–9. – С. 98–101.
2. 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.
3. Казанцева Е.А., Комарова Е.Г., Чайкина М.В., Седельникова М.Б. Получение и исследование свойств лантан- и кремний-содержащих кальцийфосфатных покрытий // Материалы VI Всероссийской конференции молодых ученых «Материаловедение, технологии и экология в третьем тысячелетии». Томск: Издательство ИОА СО РАН, 2016. – С. 169–173.

ИССЛЕДОВАНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ, ФАЗОВОГО СОСТАВА И СВОЙСТВ ПОКРЫТИЙ СИСТЕМЫ Al-Si-N, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ МАГНЕТРОННОГО ОСАЖДЕНИЯ

Р.А. Калиева[1], Е.В. Рыбалко[2]

Научный руководитель: доцент, к.ф.-м.н. И.А. Божко[1,2]

[1]Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

[2]Институт физики прочности и материаловедения СО РАН

Россия, г. Томск, пр. Академический, 2/4, 634055

E-mail: keshrim95@gmail.com

INVESTIGATION OF MICROSTRUCTURE, PHASE STATE AND PROPERTIES OF Al-Si-N SYSTEM COATINGS OBTAINED BY MAGNETRON SPUTTERING

R.A. Kaliyeva[1], E.V. Rybalko[2]

Scientific Supervisor: Ph.D., associate professor I.A. Bozhko[1,2]

[1]Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

[2]Institute of Strength Physics and Materials Science, SB RAS,

Russia, Tomsk, av. Academicheskii, 2/4, 634055

E-mail: keshrim95@gmail.com

Abstract. *We present the results of investigation of structural and phase state, mechanical and optical properties of Al-Si-N system coatings, deposed by magnetron sputtering on quartz glass.*

Введение. В настоящее время особый интерес представляет создание защитных противоударных покрытий для изделий конструкционной оптики, используемых для остекления транспортных средств. Одним из важных вопросов при создании такой защиты является выбор материала покрытия, так как он должен удовлетворять комплексу требований по механическим и оптическим свойствам. В данной работе в качестве защиты предложен способ нанесения однослойных оптически прозрачных покрытий на основе Al-Si-N. Однако анализ ряда работ [1, 2] показал, что микроструктура покрытий системы Al-Si-N, а следовательно, и их свойства в значительной степени определяются условиями их формирования в процессе магнетронного осаждения. В связи с этим, целью данной работы являлось изучить микроструктуру, фазовый состав и физико-механические свойства покрытий системы Al-Si-N, полученных методом магнетронного осаждения при разных температурах подложки.

Экспериментальная часть. Магнетронное нанесение покрытий осуществлялось на установке УВН-05МД «КВАНТ». Питание магнетрона осуществлялось от импульсного биполярного источника питания частотой 50 кГц, мощность магнетрона достигала 1,2 кВт. Отношение парциальных давлений азота и аргона 1 : 3. В качестве материала подложки использовалось кварцевое стекло марки КВ. В процессе магнетронного осаждения защитных покрытий варьировалась температура подложки в интервале от 20 до 290°С (табл.1).

Элементный состав покрытий определяли с помощью энергодисперсионного рентгеновского микроанализатора (МРСА) INCA-Energy, встроенного в сканирующий электронный микроскоп

LEOEVO-50XVP. Толщина формируемых покрытий определялась гравиметрическим методом. Структурно-фазовое состояние образцов исследовали методом рентгеноструктурного анализа (РСА) на дифрактометре ДРОН-7 в Co-Kα излучении. Спектры светопропускания покрытий Al-Si-N 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 20мН.

Результаты. По данным микрорентгеноспектрального анализа (МРСА) было установлено, что в составе всех покрытий, полученных импульсным магнетронным методом, присутствуют алюминий, кремний и азот (табл. 1). При этом соотношение атомов алюминия и кремния для всех полученных покрытий остается постоянным и составляет Al/Si≈2.

Таблица 1

Элементный состав покрытий

Образец	Температура подложки, ºС	Толщина покрытия, мкм	Содержание элементов, ат.%			Соотношение Al:Si
			Si	Al	N	
AlSiN-T20	20	2,1	17,54	36,86	45,60	2,1
AlSiN-T200	200	2,7	19,11	36,50	44,38	1,9
AlSiN-T290	290	2,9	16,86	35,51	47,63	2,1

Результаты исследования фазового состава полученных образцов методом рентгеноструктурного анализа показали, что во всех покрытиях наблюдается формирование фазы AlN с гексагональной плотноупакованной (ГПУ) структурой, α- и β-модификаций Si_3N_4. Из сравнения полученных дифрактограмм было установлено, что увеличение температуры подложки при магнетронном осаждении покрытий системы Al-Si-N приводит к изменению формы дифракционных пиков вследствие изменения микроструктуры и фазового состава формируемых покрытий. На рис. 2 показано изменение содержания фаз AlN, α- и β-модификаций Si_3N_4 в полученных композитных покрытиях системы Al-Si-N в зависимости от температуры кварцевой подложки. Соотношение между формирующимися фазами для исследуемых образцов были определены с помощью рентгенограмм по интенсивности линий (100) и (002) для AlN, (102) и (312) для α-Si_3N_4, (101) и (210) для β-Si_3N_4. Из рис. 2 следует, что повышение температуры подложки от 20 до 290°С приводит к пропорциональному росту содержания фаз AlN и β-Si_3N_4 при одновременном уменьшении содержания α-фазы нитрида кремния.

Спектры пропускания исследуемых образцов представлены на рис. 2 в сопоставлении с пропусканием света для кварцевой подложки. Из рис. 2 видно, что исходное кварцевое стекло (рис. 2, кривая 1) имеет высокую степень пропускания, составляющую 87–90 %, во всем исследуемом интервале длин волн. Нанесение защитных покрытий системы Al-Si-N приводят к незначительному уменьшению светопропускания образцов кварцевого стекла (до 75-80 %) в видимой области спектра (рис. 2, кривая 2 и 3). Осциллирующий характер экспериментальных спектров пропускания, наблюдаемый для образцов кварцевого стекла с защитными покрытиями в видимой области спектра, обусловлен явлением интерференции света в покрытиях. Анализ осцилляций на спектрах пропускания и численный расчет по методике, описанной в работе [3], позволил вычислить показатель преломления и толщину исследуемых покрытий Al-Si-N (табл. 2). Также следует отметить, что на спектрах светопропускания образцов с защитным покрытием в районе 200-380 нм (рис. 2, кривая 2 и 3) проявляется широкая полоса поглощения.

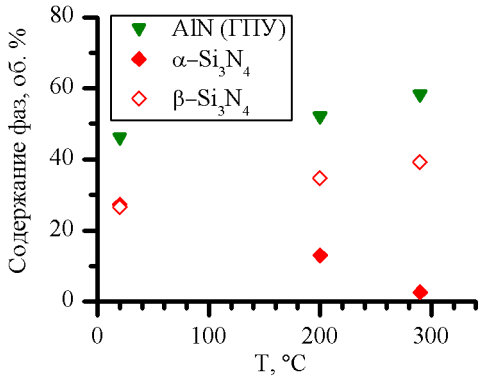


Рис. 1. Изменение содержания фаз, формируемых в композитных покрытиях системы Al-Si-N в зависимости от температуры подложки

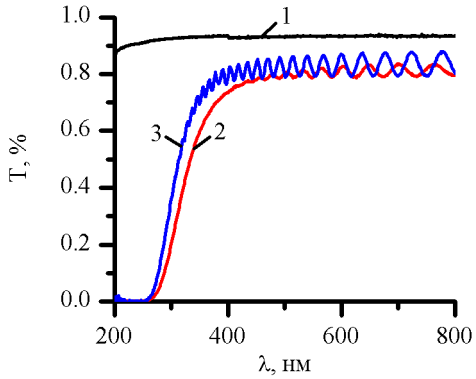


Рис. 2. Спектры пропускания образцов кварцевого стекла с защитными покрытиями: 1 – стекло КВ; 2 – AlSiN-T20; 3 –AlSiN-T200

Результаты исследования механических свойств покрытий системы Al-Si-N, сформированных в процессе магнетронного осаждения, представлены в табл. 2. Согласно этим данным, микротвердость формируемых покрытий системы Al-Si-N в независимости от температуры подложки составляет ≈ 27 ГПа и превышает микротвердость исходного кварцевого стекла в 2,7 раза. Важно отметить, что для всех покрытий системы Al-Si-N высокие значения микротвердости сочетаются с высокими значениями коэффициента упругого восстановления ($R_e \geq 0.70$).

Таблица 2

Оптические и механические свойства покрытий

Образец	Показатель преломления	H (ГПа) (F=20,00мН)	E* (ГПа) (F=20,00мН)	k_y
Подложка	1,46	9,9 ± 0,11	72,2 ± 0,32	0,71
AlSiN-T20	1,96	26,5 ±0,35	207,8 ±0,77	0,74
AlSiN-T200	1,92	27,0±0,32	205,8 ±0,97	0,74

Заключение. Результаты РСА показали, что метод импульсного магнетронного осаждения позволяет формировать на поверхности кварцевого стекла композитные покрытия, содержащие фазы AlN (ГПУ), α-Si_3N_4 и β-Si_3N_4, соотношение которых зависит от температуры подложки кварцевого стекла в процессе осаждения. Исследование оптических свойств показало, что коэффициент пропускания для всех исследуемых покрытий составляет ~75–80 %. Полученные методом импульсного магнетронного осаждения защитные покрытия системы Al-Si-N характеризуются высокими значениями микротвердости (≈ 27 ГПа) наряду с высокими значениями коэффициента упругого восстановления ($R_e \geq 0.70$).

Работа выполнена в рамках основной научной программы исследований академии наук за 2013-2020 гг. и при поддержке программы развития НИ ТПУ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. A. Pélisson-Schecker, H.J. Hug, J. Patscheider, Surface & Coatings Technology, 257 114–120 (2014).
2. H. Liu, W. Tang, D. Hui, et. al., Thin Solid Films, 517 5988–5993 (2009).
3. Комраков Б.М., Шапочкин Б.А. Измерение параметров оптических покрытий. – М.: Машиностроение, 1986. – 136 с.

PRECISE RO-VIBRATIONAL ANALYSIS OF VIBRATIONAL BANDS IN 1100-1400 CM^{-1} REGION OF SPECTRUM OF C_2HD_3

N.V. Kashirina

Scientific supervisor: Dr. E.S. Bekhtereva

Language adviser: Assoc. Pr., Yu.Yu. Veber

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

E-mail: refenement@mail.ru

ТОЧНЫЙ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ВРАЩАТЕЛЬНЫХ ПОЛОС В ДИАПАЗОНЕ СПЕКТРА 1100-1400 $СМ^{-1}$ МОЛЕКУЛЫ C_2HD_3

Н.В. Каширина

Научный руководитель: д.ф.-м.н. Е.С. Бехтерева

Языковой консультант: к.п.н. Ю.Ю. Вебер

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

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

E-mail: refenement@mail.ru

Аннотация. *В настоящей работе представляются результаты исследования колебательно-вращательных спектров молекулы C_2HD_3 в диапазоне 1100 – 1400 $см^{-1}$. Экспериментальные спектры были зарегистрированы в Техническом Университете Брауншвейга (Германия) с разрешением 0,0021 $см^{-1}$. На основе комбинационных разностей, полученных из анализа полос ν_8 и ν_{12}, улучшены параметры основного колебательного состояния. Новый набор спектроскопических параметров, позволил идентифицировать в экспериментальном спектре около 1900 переходов полосы ν_{12}. Анализ полосы ν_{12} позволяет так же найти комбинационные полосы $2\nu_{10}$, $\nu_7 + \nu_{10}$ и $\nu_4 + \nu_{10}$, проявляющиеся в спектре поглощения за счет сильных резонансных взаимодействий.*

Introduction. One of the most important problems of physical chemistry and chemical physics is the problem of precise determination of intramolecular potential energy surface (PES) of a molecule. Knowledge of a correct PES is the key point in solving the Schrodinger equation of a molecule, which gives one a possibility to determine a correct set of the corresponding molecular Hamiltonian's eigenfunctions. In turn, knowledge of correct eigenfunctions allows one to tackle numerous both purely scientific and applied problems in physical chemistry, astrophysics, planetology, atmospheric and environmental sciences, etc. For the determination of molecular PES, one needs a large amount of experimentally recorded and analyzed ro-vibrational bands. It should be noted that the larger number of experimental data, the more precise results one can expect.

Information about rotational structures of different ro-vibrational bands can be obtained from the analysis of ro-vibrational spectra. Assignment of spectral lines allows one to receive information about lower and upper states between which a transition is possible. Therefore, recording and analyzing molecular experimental spectra can provide us with the information about energies of the studied molecule. The values of energy levels, in turn, are determined by internal physical properties of a molecule. Consequently, finding out the energy levels, one

can determine the exact values of interatomic distances, vibrational frequencies, force constants, dissociation energies, and other quantities characterizing the internal properties of polyatomic molecule.

Ethylene molecule, which is broadly discussed in the scientific environment, is an important object of study from the fundamental as well as applied point of view. It should be noted that the study of this molecule is timely due to a number of reasons. Firstly, ethylene is a leading product, which is used for the production of almost half of all organic compounds. Many of these compounds are released into the atmosphere by chemical and petrochemical industrial enterprises, which leads to the generation of ozone and formation of a global climate [1, 2]. Secondly, ethylene is one of the most important objects of research in astrophysics, physics and chemistry of the planets in the solar system (in particular, it was found in the atmospheres of the giant planets and their satellites) [3]. Thirdly, ethylene acts as a hormone in plants, and, for that reason, may be used to accelerate the ripening of fruits. In addition, ethylene molecule can be considered as a good model for solving problems of physical chemistry, such as the determination of potential hypersurfaces of many organic molecules or the study of the chemical reactions kinetics.

Ethylene molecule has been actively researched for many years. However, a complete study of this molecule, in particular, determination of its potential surface, is impossible without examination of all its isotopologues. This work is devoted to the consideration of one of the ethylene isotopologues, C_2HD_3, in the region of 1100-1400 cm^{-1}.

Experimental details. The Fourier transform infrared spectra of C_2HD_3 have been recorded in the wavenumber range from 1100 to 1400 cm^{-1} with a Brucker IFS 120 FTIR spectrometer (in the Braunschweig Infrared Laboratory, Braunschweig, Germany) in combination with a stainless steel White cell. Two spectra have been used for the present analysis. The first spectrum was recorded with the sample pressure of 1 mbar, the optical path length of 4 m, and scan numbers of 350 (Fig. 1). Experimental conditions for the second spectrum are as follows: 5 mbar, 24 m, and 300 scans. The experimental resolution was 0.0021 cm^{-1} for all spectra.

Assignment of transitions. Symmetry group of C_2HD_3 molecule is isomorphic to the C_s point symmetry group, which has only two irreducible representations (A' and A''). As the consequence, the $A' \leftarrow A'$ bands are the hybrid bands, and transitions of both a and b – types are allowed in such bands. In the $A'' \leftarrow A'$ bands only c-type transitions are allowed. Four bands are located in the investigated region: the ν_{12} (A') fundamental band and the $2\nu_{10}$ (A'), $\nu_7 + \nu_{10}$ (A''), and $\nu_4 + \nu_{10}$ (A'') combinational bands.

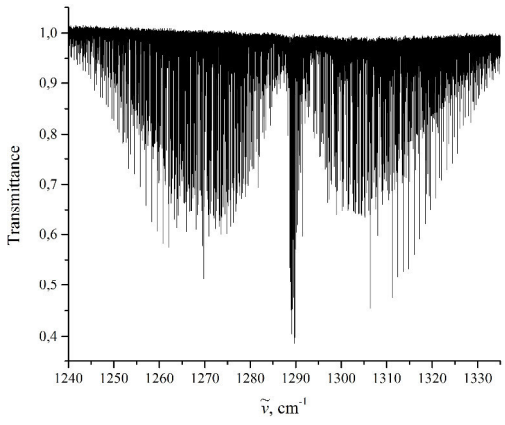


Fig. 1. Experimental spectrum of molecule C_2HD_3 in the region of the ν_{12} band. P = 1 mbar, l = 4 m

The fundamental band ν_{12} is the most intensive one as compared to other bands in the investigated region. Different bands cannot be assigned without strong local resonance interactions of Coriolis and/or Fermi types. This happens due to borrowing of intensities from adjacent bands. Consequently, analysis of strong intensive ν_{12} band will enable us to determine other combination bands in the target region.

Assignment of transitions was made on the basis of the Ground State Combination Differences (GSCD) method. The ground state rotational energies have been calculated with the parameters from [4]. It should be mentioned, that parameters from [4] have been obtained on the basis of only *c*-type from the ν_8 band. This means that parameters from [4] cannot be considered as good enough for other types of transitions. In our case, it was found out that the differences between the experimental GSCD and the ones calculated with the parameters from [4] were increased with the increasing of the value *J* for $J \geq 40$ (see Fig. 2, for illustration). This indicates that the set of parameters of ground state can be improved. A combination of differences obtained for the ν_{12} band (*a* and *b* – type transitions) and spectroscopic data of the ν_8 band (*c* - type) [4] were used for improving the ground vibrational state parameters. A new set of parameters enables one to make analysis of any type of transitions. As a result, about 1900 transitions with maximum values of upper quantum numbers $J^{max} = 52$ and $K_a^{max} = 13$ have been assigned to the ν_{12} band.

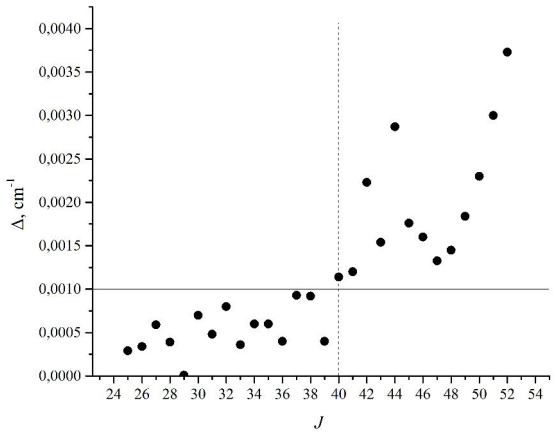


Fig. 2.Dependence of ground state combinational differences on quantum number J for $K_a = 0$

Acknowledgements. The work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (Grant no. 16-32-00306 mol_a).

REFERENCES

1. Abele F.B., Heggetad H.E. Ethylene: an urban air pollutant // J. Air Pollut. Control Assoc. - 1973. - V.23. - P. 517-21.
2. Martin J.M.L., Lee T.J., Taylor P.R., Francois J.P. The anharmonic force field of ethylene, C2H4, by means of accurate ab initio calculations // J. Chem. Phys. - 1995. - V. 103. - P. 2589–2602.
3. Coustenis A., Achterberg R.K., Conrath B.J., Jennings D.E., Marten A., Gautier D., et al. The composition of Titan's stratosphere from Cassini CIRS midinfrared spectra // Icarus. - 2007. - V. 189. - P. 35–62.
4. Ng L.L., Tan T.L., Gabona M.G., Godfrey P.D., McNauhton D. High-resolution FTIR spectroscopy of ethylene-d_3 (C_2HD_3): Rovibrational constants for the ground state and the $v_8 = 1$ state // J. Mol. Spec. – 2015. – V. 316. – P. 79-83

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ХАРАКТЕРИСТИК СЕНСОРОВ H_2 НА ОСНОВЕ ТОНКИХ ПЛЕНОК Pt/Pd/Au/SnO_2:Sb, Ag, Y и Au/SnO_2:Sb, Ag, Y

С.В. Ким, А.В. Алмаев

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. В.И. Гаман

Национальный исследовательский Томский государственный университет,

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

E-mail: thestimas@mail.ru

TEMPERATURE DEPENDENCE OF CHARACTERISTICS OF THE HYDROGEN SENSORS BASED ON THIN FILMS OF Pt/Pd/Au/SnO_2:Sb, Ag, Y и Au/SnO_2:Sb, Ag, Y

S.V. Kim, A.V. Almaev

Scientific Supervisor: Prof., Dr. V.I. Gaman

Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenina ave., 36, 634050

E-mail: thestimas@mail.ru

Absract. *The results of research of the temperature dependences of resistance and response of the hydrogen sensors based on the thin films of Pt/Pd/Au/SnO_2:Sb, Ag, Y and Au/SnO_2:Sb, Ag, Y are presented in this work. The catalytic layers Pt/Pd/Au lead to high sensitivity of sensors to exposure of hydrogen. The range of operating temperatures of the hydrogen sensors is 600 – 720 K.*

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 поверхность полупроводника. В настоящей работе на примере тонких пленок диоксида олова исследованы температурные зависимости сопротивления и отклика на воздействие водорода.

В атмосфере воздуха, атомы и молекулы кислорода активно хемосорбируются на поверхность SnO_2, в результате чего в приповерхностной области полупроводника генерируется область пространственного заряда ОПЗ [1]. При помещении сенсора в газовую смесь содержащую водород, происходит его взаимодействие с ранее хемосорбированным кислородом, ведущие к уменьшению ширины ОПЗ. Изменения ОПЗ при воздействии газов определяют проводимость сенсоров.

Для повышения эффективности работы сенсоров, плёнки SnO_2 модифицируют добавками металлов на поверхности и в объеме. В качестве объекта исследований были выбраны сенсоры на основе тонких пленок Pt/Pd/Au/SnO_2:Sb, Ag, Y и Au/SnO_2:Sb, Ag, Y. Сурьма является мелкой донорной примесью и позволяет снизить рабочее сопротивление плёнок до 0,1-10 МОм. Добавки благородных металлов на поверхности SnO_2 играют роль катализаторов реакций, имеющих мести при хемосорбции газов [2]. Согласно литературным данным [3], тройной катализатор Pt/Pd/Au обеспечивает высокий отклик на восстановительные газы. Сенсоры с добавками Au на поверхности демонстрируют быстродействие при воздействии H_2 на уровне нескольких секунд [4]. Кроме того, отмечается [2], что нанесение Au на поверхность SnO_2 обеспечивает селективность к водороду в присутствии CO и CH_4.

Добавки в объеме в большей мере контролируют сопротивление, микроструктуру и дрейф характеристик сенсоров при испытаниях. Добавка Ag, как на поверхности, так и в объеме пленок SnO_2 способствует возрастанию чувствительности пленок и снижению рабочей температуры сенсоров [5]. По предварительным данным добавки Y препятствуют дрейфу характеристик сенсоров при длительных испытаниях. Таким образом, сенсоры на основе тонких пленок Pt/Pd/Au/SnO_2:Sb, Ag, Y и Au/SnO_2:Sb, Ag, Y должны обладать высокой чувствительностью к водороду, быстродействием и вместе с этим стабильностью при длительных испытаниях.

Пленки SnO_2 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 $S_{Ag}/S_{Sn}=3\cdot10^{-3}$ и $S_Y/S_{Sn}=3\cdot10^{-3}$. Готовые образцы подвергали отжигу при $T_{отж}=723$ K.

В таблице 1 сопоставлены основные электрофизические и газочувствительные параметры сенсоров на основе различных материалов. Плёнки Pt/Pd/Au/SnO_2:Sb, Ag, Y отличаются высоким сопротивлением R_0 в атмосфере чистого воздуха во всей области температур T (рис. 1). Такое поведение обусловлено влиянием катализаторов, особенно Pt и Pd. Ранее в наших и в работах других авторов было показано, что такие катализаторы стимулируют хемосорбцию кислорода на поверхность SnO_2, в результате чего растет сопротивление образцов и отклик на воздействие газов [1–3]. Золото по своим каталитическим свойствам уступает Pt и Pd, поэтому образцы Au/SnO_2:Sb, Ag, Y обладают низким сопротивлением.

При повышении T от комнатной температуры до 500 K R_0 $\ln R_0$ образцов на основе Pt/Pd/Au/SnO_2:Sb, Ag, Y падает за счет ионизации мелких и глубоких донорных уровней в объеме пленок. Для этого материала в области низких температур имеются два линейных участка, которые могут быть аппроксимированы кривыми Аррениуса. Каждому участку соответствует энергия активации ΔE_a, величина которой зависит от типа добавок в объеме и на поверхности пленок SnO_2 [1]. В области температур 300 – 370 K ΔE_{a1}=0,47 эВ, а в области 370 – 670 K ΔE_{a2}=0,63 эВ. На температурной зависимости сопротивления образцов на основе плёнок Au/SnO_2:Sb, Ag, Y имеется один участок спада $\ln R_0$ в области температур 300-470 K с энергией активации ΔE_{a1}= 0,41 эВ.

Таблица 1

Параметры сенсоров: R_0 при T=300 K; энергии активации проводимости ΔE_{a1}, ΔE_{a2}; температура максимального отклика T_{MAX}; отклик сенсора на воздействие 100 ppm H_2 при $T=T_{MAX}$

Материал сенсоров	R_0, кОм	ΔE_{a1}, эВ	ΔE_{a2}, эВ	T_{MAX}, K	G_H/G_0
Au/SnO_2:Sb,Ag,Y	37,1	0,41	-	773	6,7
Pt/Pd/Au/SnO_2:Sb,Ag,Y	$2.9\cdot10^3$	0,47	0,63	723	12

При дальнейшем повышении T до 723 K для сенсоров на основе Pt/Pd/Au/SnO_2:Sb, Ag, Y и до 773 K для сенсоров на основе Au/SnO_2:Sb, Ag, Y наблюдается рост сопротивления пленок за счет увеличения поверхностной плотности хемосорбированного кислорода в форме O^- [1]. Такой вид зависимости $\ln R_0$ от $1000/T$ проявляется как для тонких, так и для толстых пленок SnO_2, независимо от технологии получения

пленок SnO_2 и типа добавок. Стоит отметить, что, как правило, именно в той области температур сенсоры обладают высокой чувствительностью к газам.

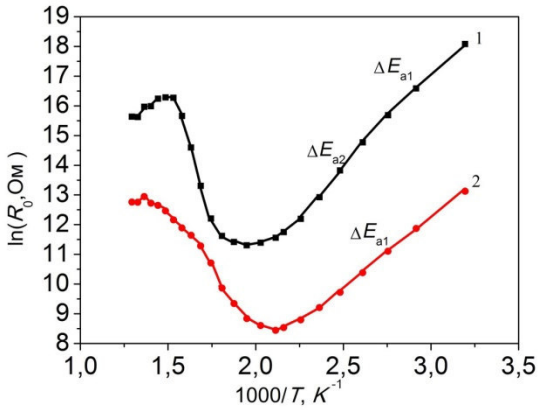


Рис. 1. Температурная зависимость сопротивления сенсоров Pt/Pd/Au/SnO_2:Sb, Ag, Y – кр.1 и Au/SnO_2:Sb, Ag, Y – кр.2

Температурная зависимость отклика характеризуется наличием максимума при температуре T_{MAX}. Наличие этого максимума обусловлено максимальной поверхностной плотностью хемосорбированного кислорода, который является центром адсорбции для водорода. В таблице 1 сопоставлены значения T_{MAX} и отклика на 100 ppm водорода при этой же температуре. Откликом называется отношение проводимости при воздействии газа G_H и в атмосфере чистого воздуха G_0. Сенсоры с тройным катализатором на поверхности Pt/Pd/Au демонстрируют пониженное значение T_{MAX} и высокой отклик. В качестве рабочей температуры сенсоров при детектировании H_2 необходимо выбрать $T<T_{отж}$, в случае работы сенсора при $T>T_{отж}$ происходит изменение микроструктуры пленок SnO_2, что ведет к нестабильности параметров приборов. В качестве интервала рабочих температур целесообразнее выбирать диапазон от 600 до 720 *K*.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гаман В.И. Физика полупроводниковых газовых сенсоров: монография. – Томск: Издательство НТЛ, 2012. – 112 с.
2. Севастьянов Е.Ю., Максимова Н.К., Новиков В.А., и др. Влияние добавок Pt, Pd, Au на поверхности и в объеме тонких пленок диоксида олова на электрические и газочувствительные свойства // ФТП. – 2012. – Т.46. – №.6 – С.820–828.
3. Toshio Itoh, Ichiro Matsubara, Masahiro Kadosak, et al. Effects of high-humidity aging on platinum, palladium, and gold loaded tin oxide—volatile organic compound sensors // Sensors. – 2010. – V.10. – P.6513–6521.
4. Ying Wang, Zhenting Zhao, Yongjiao Sun, et al. Fabrication and gas sensing properties of Au-loaded SnO2 composite nanoparticles for highly sensitive hydrogen detection // Sensors and Actuators B. –V.240. – 2017. – P.664–673.
5. Korotcenkov G., Cho B.K., Gulina L.B., Tolstoy V.P. Gas sensor application of Ag nanoclusters synthesized by SILD method // Sensors and Actuators B. – V.166 – 167. – 2012. – P.402 – 410.

ПОЛУЧЕНИЕ Ni_x/Au_{1-x} НАНОТРУБОК МЕТОДОМ ШАБЛОННОГО СИНТЕЗА

А.Л. Козловский, А.С. Загребова, М.А. Ибрагимова
Научный руководитель: доцент, к.ф.т.н. М.В. Здоровец
Институт Ядерной физики МЭ РК,
Казахстан, г. Астана, пр. Абылай хана, 2/1, 010008
E-mail: artem88sddt@mail.ru

THE OBTAINMENT OF Ni_x/Au_{1-x} NANOTUBES BY TEMPLATE SYNTHESIS

A.L. Kozlovskiy, A.S. Zagrebova, M.A. Ibragimova
Scientific Supervisor: Ass. prof. M.V. Zdorovets
Institute of Nuclear Physics of Republic of Kazakhstan, Kazakhstan, Astana, Abylaikhan str., 2/1, 010008
E-mail: artem88sddt@mail.ru

Abstract. *This work is dedicated to methods of obtaining Ni/Au nanotubes by template synthesis using polymer membranes, by sequential chemical and electrochemical deposition of nanotubes. Additionally in the paper their morphological and structural properties. It is found that in contrast to Ni and Au nanotubes, in Ni/Au nanotubes there is the preferential texture direction (111), confirming the assumption that the preferential Ni/Au nanotube growth is along the pore walls of template. EDA and XRD methods have been applied to determine the degree of the oxidation and the appearance of oxide compounds in the structure of the synthesized samples.*

Введение. Одним из наиболее перспективных материалов для создания магнитных носителей лекарств и белков являются нанотрубки на основе никеля и золота. Нанопроволоки и нанотрубки с их удлиненной формой и анизотропией магнитных свойств позволяют преодолеть характерные для наночастиц ограничения [1,2]. По сравнению с нанопроволоками у нанотрубок обнаруживаются некоторые потенциальные преимущества, например, отсутствие магнитной сердцевины, что позволяет создавать наноструктуры с однородными полями коммутации, гарантирующими воспроизводимость результатов; меньшая удельная плотность позволяет плавать в жидкостях (в том числе биологических) и делает их пригодными для применения в биотехнологии; большая удельная площадь поверхности обеспечивает большее количество функциональных связей и, соответственно, перемещения большего количества целевых компонентов при адресной доставке. Применение золотого покрытия позволяет не только защитить магнитный сердечник от коррозии, но и увеличивает количество функциональных групп для привязки лекарственных препаратов.

Экспериментальная часть. В качестве исходного материала использовалась ПЭТФ пленка толщиной 12 мкм марки Hostaphan® производства фирмы «Mitsubishi Polyester Film» (Германия). Пленка облучалась на ускорителе тяжелых ионов ДЦ-60 (Астана, Казахстан) ускоренными ионами криптона с энергией с энергией 1.75 МэВ/нуклон и флюенсом 4×10^7 ион/см^2 [21,22]. В результате облучения в ПЭТФ пленке образуются латентные треки. Облученные пленки подвергались химическому травлению в 2,2 М растворе NaOH при температуре 85 ±0,1 ºС в течение 210с с последующей обработкой в растворах нейтрализации (3,0 М раствор уксусной кислоты и деионизированной воды). Размерность пор

определялась методом растровой электронной микроскопии (РЭМ) и методом газопроницаемости с помощью уравнения Хагена-Пуазейля. Размерность пор образца составила 430±10 нм.

Исследование структуры и характеристических размеров синтезированных НТ проводилось посредством растровой электронной микроскопии (РЭМ) на микроскопе Hitachi TM3030 с системой энергодисперсионного анализа (ЭДА) Bruker XFlash MIN SVE при ускоряющем напряжении 15 кВ. Изучение диаметров пор и внутренних диаметров находящихся в ПЭТФ шаблонах нанотрубок проводилось манометрическим методом, основанном на измерении изменения давления газа в замкнутой камере при давлении в интервале от 8 до 20 кПа с шагом 4 кПа. Рентгеноструктурный анализ (РСА) проводился на дифрактометре D8 ADVANCE с использованием излучения рентгеновской трубки с Cu – анодом и графитового монохроматора на дифрагированном пучке. Дифрактограммы записывались в диапазоне углов 30–100˚ 2θ, с шагом 0,02˚ 2θ.

Результаты и обсуждение. Для потенциального практического применения в области адресной доставки лекарственных препаратов наибольший интерес представляют золотые наноструктуры с магнитным сердечником. Для получения Ni/Au нанотрубок были совмещены две методики синтеза, где темплатной матрицей для синтеза Ni нанотрубок служит матрица с осажденными Au нанотрубками с толщиной стенок 30±5 нм, подвергшаяся с одной стороны предварительной очистке поверхностного слоя от золотого покрытия, образовавшегося в процессе химического осаждения Au. Изучение элементного состава и кристаллической структуры синтезированных Ni/Au нанотрубок было проведено методами ЭДА и РСА. Результаты представлены на рисунке 1.

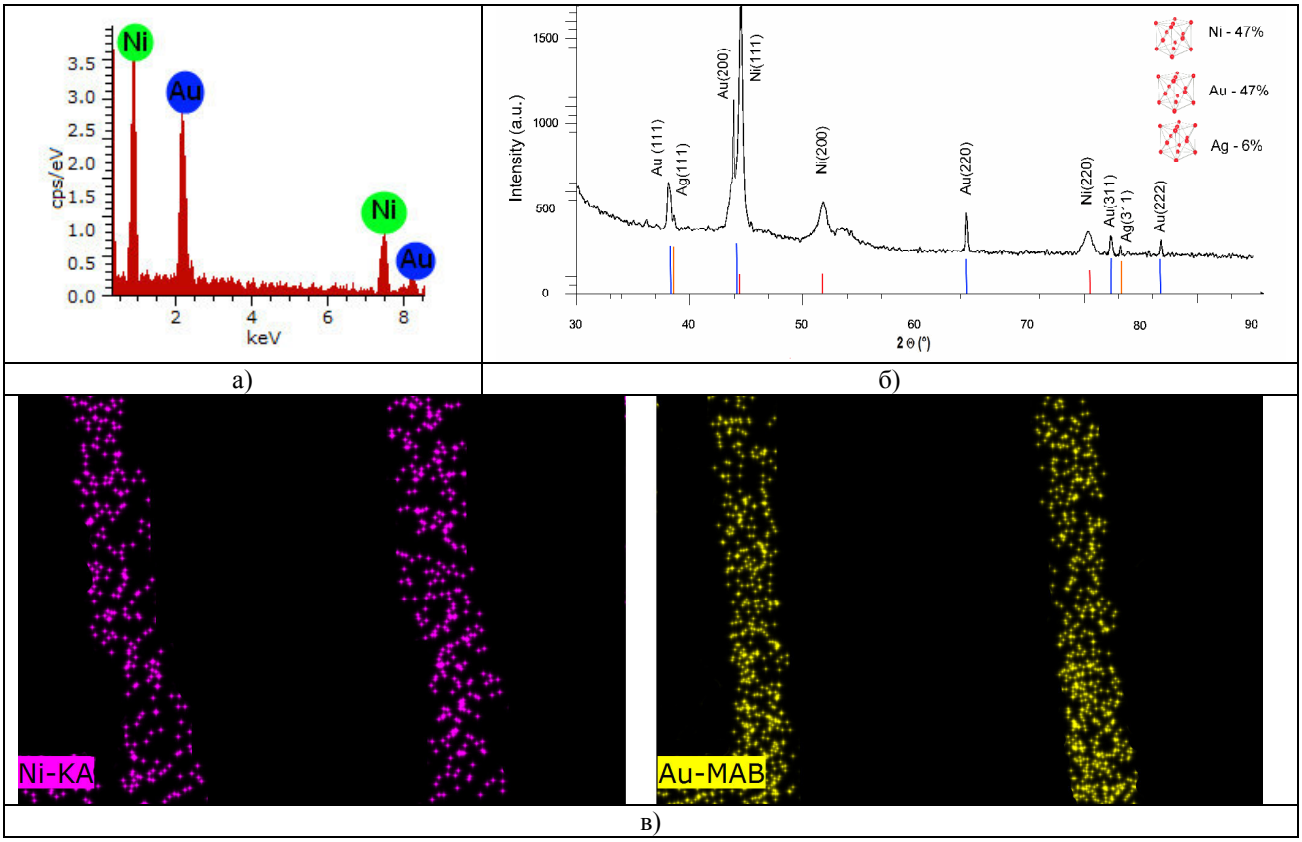


Рис. 1. а) ЭДА спектр Ni/Au нанотрубок; б) Рентгенограмма Ni/Au нанотрубок; в) результаты картирования Ni/Au нанотрубок

Согласно результатам ЭДА атомное соотношение металлов Ni/Au в структуре нанотрубок составило 48/46 соответственно, наличие 6% Ag обусловлено присутствием серебра в структуре Au нанотрубок. Анализ рентгеновской дифрактограммы позволил сделать следующие выводы о структуре: синтезированные образцы представляют собой двухфазные нанотрубки с фазой ГЦК – Ni с параметром a = 3,5216 Å и ГЦК – Au с параметром a = 4,0763 Å. Увеличение параметра *a* для ГЦК – Ni может быть обусловлено наличием в кристаллической структуре твердого раствора замещения атомами Au атомов Ni в решетке, размеры которых меньше атомов Au (115 нм для Ni и 144 нм для Au). Наличие Ag в структуре нанотрубок также подтверждается наличием малоинтенсивных пиков Ag на рентгенограмме. Вклад каждой фазы в кристаллическую структуру (вставка на рисунке 1б) оценивался по площадям соответствующих пиков, что хорошо согласуется с результатами ЭДА.

Заключение. В работе представлена методика создания Ni/Au нанотрубок методом темплатного синтеза с использованием полимерных мембран, последовательного химического и электрохимического осаждения нанотрубок, проводится детальное изучение их морфологических и структурных свойств. Для получения Ni/Au нанотрубок были совмещены две методики синтеза, где темплатной матрицей для синтеза Ni нанотрубок служит матрица с осажденными Au нанотрубками с толщиной стенок 30±5 нм, подвергшаяся с одной стороны предварительной очистке поверхностного слоя от золотого покрытия, образовавшегося в процессе химического осаждения Au. Методами РЭМ, ЭДА и РСА установлено, что в Ni/Au нанотрубках присутствует выделенное текстурное направление (111), что подтверждает предположение о преимущественном росте Ni/Au нанотрубок вдоль стенок пор темплата.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bucak S., Yavuztürk, B. Sezer A. D. Magnetic Nanoparticles: Synthesis, Surface Modifications and Application in Drug Delivery // Recent Adv. Nov. Drug Carr. Syst. – 2012. – Vol. 2. – P. 165–200.
2. Liu Z., Zhang Q., Shi G.J. Solvothermal synthesis and magneto-optical properties of Zn1 – xNixO hierarchical microspheres // Magn. Magn. Mater. – 2011. – Vol. 323. – № 7. – P. 1022–1026.

ОБ УЛУЧШЕНИИ ПАРАМЕТРОВ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ МОЛЕКУЛЫ $C_2H_2D_2$ – CIS НА ОСНОВЕ ВЫСОКОТОЧНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ О ПОЛОСАХ ν_{10}, ν_7, $\nu 6$ И ν_3

Ю.В. Конова

Научный руководитель: профессор, к.ф-м.н. О.В. Громова

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россияг.Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: ch-yuliya28@mail.ru

ON THE IMPROVOMENT OF THE GROUND VIBRATIONAL STATE PARAMETERS OF THE $C_2H_2D_2$ – CIS MOLECULE ON THE BASIS OF PRECISE EXPERIMENTAL DATA ON THE ν_{10}, ν_7, $\nu 6$ И ν_3 BANDS

Yu.V. Konova

Scientific Supervisor: Prof., PhD. O.V. Gromova

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

E-mail: ch-yuliya28@mail.ru

Abstract. *$C_2H_2D_2$-cis is an asymmetric top molecule with twelve different vibrational modes. Because of its symmetry (C_{2v}), all vibrational states of the $C_2H_2D_2$-cis molecule are divided into 4 groups of the states of different symmetry. In the present study the ν_{10} (A_1), ν_7 (B_2), ν_6 (B_1) and v3 (A_1) bands of the $C_2H_2D_2$-cis are considered. Ground state rotational and centrifugal distortion parameters are improved on the basis of the IR experimental data of the present study. The FTIR spectra were recorded with a Brucker 120HR spectrometer in Technological university of Braunschweig (Germany) at room temperature with a pressure of 0.07, 1.5 and 2.0 mbar, an absorption path length of 4, 4, 24, respectively, and a spectral resolution of 0.0021 cm^{-1}. As the results of the fit of obtained values of the ro-vibrational energy levels, the set of 16 parameters of the ground vibrational state was determined which reproduced the initial energy values with an experimental accuracy.*

Введение. Колебательно-вращательная спектроскопия является одним из важнейших источников количественной информации о квантово-механических характеристиках объектов микромира. Изучение тонкой структуры позволяет определить фундаментальные характеристики молекул, которые предоставляют возможность для исследования различных сложных эффектов внутримолекулярной природы. Колебательно–вращательные спектры поглощения высокого разрешения дают наиболее полную информацию о характере внутримолекулярных взаимодействий состояний и свойствах молекул. Определяемые из эксперимента параметры спектральных линий содержат информацию о важнейших структурных и динамических параметрах молекул таких как: структурные постоянные, внутримолекулярное силовое поле, межмолекулярный потенциал, электрический и магнитный моменты. Анализ спектров позволяет определить точные значения межатомных расстояний, частот колебаний и силовых постоянных, энергий диссоциаций и других величин, характеризующих структуру многоатомных молекул. Полученные данные о колебательно-вращательном движении молекул

необходимы для решения различных задач астрофизики, атмосферной оптики, физики полупроводников и других научных и технических проблем [1,2].

Для корректности решения колебательно – вращательной задачи необходимо выполнение как минимум двух главных условий. Это наличие высокоточных экспериментальных данных и корректно определенные параметры математической модели основного колебательного состояния. В связи с этим в данной работе приводятся результаты по уточнению параметров, описывающих вращательную структуру основного состояния молекулы $C_2H_2D_2$ – cis. Уточнение параметров было произведено на основе высокоточной экспериментальной информации о колебательно-вращательных полосах, находящихся в диапазоне инфракрасных длин волн 600 – 1200 $см^{-1}$.

Объект исследования. Молекула $C_2H_2D_2$ – cis является изотопологом молекулы этилена, C_2H_4, которая в свою очередь представляет интерес для изучения, как с теоретической, так и с практической точки зрения. Молекула этилена является прототипом для различных органических молекул, вследствие чего интенсивно изучается в физической химии. Также этилен и его изотопологи ($C_2H_2D_2$ – cis, $C_2H_2D_2$ – trans, $C_2H_2D_2$ – as и др.) являются объектами исследований в астрофизике и планетологии, т.к. были обнаружены в атмосферах планет гигантов (Юпитер, Сатурн, Нептун) и экзо – планет.

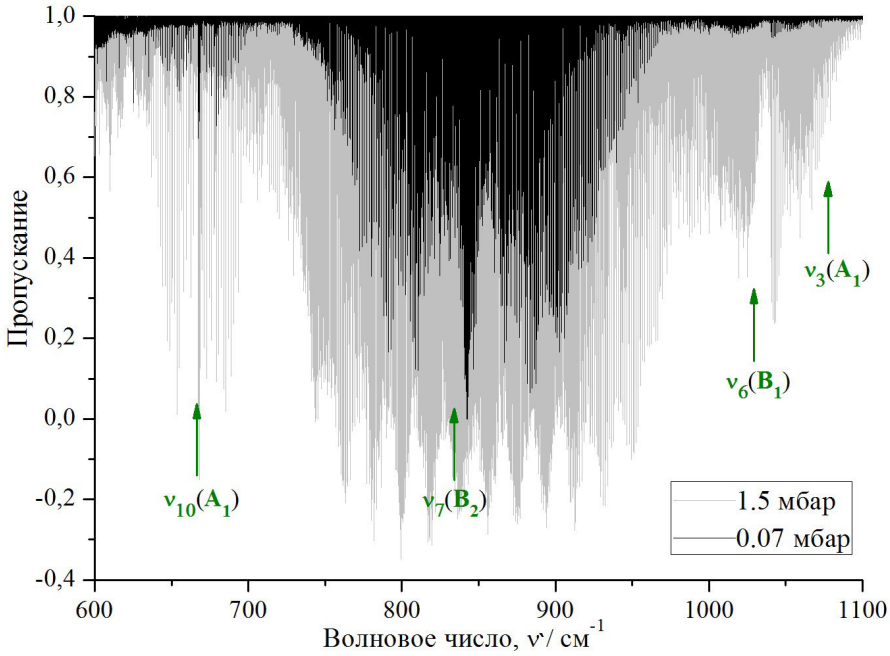


Рис. 1. Спектр пропускания $C_2H_2D_2$ – cis в диапазоне 600-1100 $см^{-1}$

Экспериментальная часть. Для анализа высокоточных экспериментальных данных использовались три спектра молекулы $C_2H_2D_2$ – cis диапазона длин волн 580-1210 $см^{-1}$. Спектры были зарегистрированы на Фурье-спектрометре Bruker IFS 120 в Техническом университете г. Брауншвейга (Германия), в основе работы которого лежит принцип интерферометра Майкельсона. Исследуемый образец находился в газообразном состоянии при комнатной температуре при давлении 0.07, 1.5 и 2.0 мбар, оптическая длина пути составляла 4, 4 и 24 м соответственно. Процедура детектирования спектра осуществлялась MCT (Mercury-Cadmium-Telluride) детектором. Используемый при регистрации спектров образец газа молекулы cis-$C_2H_2D_2$ был приобретен у Кембриджской изотопной лаборатории (Cambridge Isotope Laboratories). Химическая и изотопическая чистота образца оценивается более чем в 99%.

Экспериментальное разрешение прибора составляет 0,0021 см$^{-1}$. Спектры были откалиброваны с помощью спектральных линий молекул N_2O и H_2O.

Методы исследования. Молекула $C_2H_2D_2$ – является молекулой типа ассиметричный волчок, имеет 12 нормальных колебаний и 4 неприводимых представления [3] и принадлежит группе симметрии, изоморфной точечной группе C_{2v}.. Для описания экспериментальных данных была использована модель эффективного гамильтониана с учетом резонансов между исследуемыми состояниями [4]:

$$H^{vib.-rot.} = \sum_{\nu,\tilde{\nu}}^{4} |\nu\rangle\langle\tilde{\nu}| H^{\nu\tilde{\nu}},$$

где $|1\rangle = (\nu_{10} = 1, A_1)$, $|2\rangle = (\nu_7 = 1, B_2)$, $|3\rangle = (\nu_6 = 1, B_1)$, $|4\rangle = (\nu_3 = 1, A_1)$.

В ходе проделанной работы были исследованы вращательные структуры полос ν_7, ν_6 (ранее были исследованы в работах [5,6]) и ν_{10}, ν_3, структуры которых были исследованы впервые. Вращательные энергии основного состояния были рассчитаны с параметрами из работы [7]. Корректность интерпретации контролировалась построением соответствующих «экспериментальных» комбинационных разностей основного состояния (КРОС). Было обнаружено, что начиная с квантовых чисел J=20-22, разницы между значениями КРОС, полученные из экспериментальных переходов и рассчитанных при помощи [7], начинает увеличиваться с возрастанием главного квантового числа. По этой причине было сделано уточнение параметров основного колебательного состояния. Для улучшения параметров было использовано более чем 800 комбинационных разностей с максимальными значениями квантовых чисел J_{max}=38 $K_a^{\max}$=17. На основе полученных колебательно–вращательных энергий была решена обратная спектроскопическая задача и определен набор параметров эффективного гамильтониана для основного состояния, который позволяет воспроизводить исходные экспериментальные данные со среднеквадратичным отклонением 0,0001 см$^{-1}$.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-00-00001 мол_а

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ландау Л. Д. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. – М.: Наука, 1989. – С. 71-74.
2. Papousek D., Aliev M.R. Molecular Vibrational – Rotational spectra. – Elsevier: Amsterdam, 1982.
3. Макушкин Ю.С. Симметрия и ее применения к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул /Ю.С. Макушкин, О.Н. Улеников, А.Е. Чеглоков . - Томск : Изд-во Том. Ун-та, 1990.-224с.
4. Watson. J.K.G. Determination of centrifugal coefficients of asymmetric – top molecules. - J. Chem. Phys. – 1967. –Т. 46 – С.1935-1949.
5. Tan T.L., Lebron G.B. High-resolution infrared analysis of the ν7 band of cis-ethylene- d2 (cis-C2H2D2)// J. Mol. Spectrosc. 2010; 261:87-90.
6. Tan T.L., Gabona M.G. Analysis of the Coriolis interaction between ν6 and ν4 bands of ethylene-cis-d2 (cis-C2H2D2) by high-resolution FTIR spectroscopy// J. Mol. Spectrosc. 2012; 272:51-4.
7. Hegelund F., Nicolaisen F.M. the Infrared Spectrum of Gaseous cis-d2-ethylene below 1400 cm-1// J. Mol.Spectrosc. 1987; 126:32-57.

ПОЛУЧЕНИЕ НАНОРАЗМЕРНОГО ДИОКСИДА КРЕМНИЯ В ПЛАЗМЕ ДУГОВОГО РАЗРЯДА

П.В. Космачев[1],

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. В.А. Власов[1,2]

[1]Томский государственный архитектурно-строительный университет,

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

[2]Национальный исследовательский Томский политехнический университет

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

E-mail: pvkosm@gmail.com

SILICON DIOXIDE NANOPOWDER OBTAINING WITH THE USE OF ARC DISCHARGE PLASMA

P.V. Kosmachev[1]

Scientific Supervisor: Prof., Dr. V.A. Vlasov[1,2]

[1]Tomsk State University of Architecture and Building, Russia, Tomsk, Solyanaya sq., 2, 634003

[2]National Research Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: pvkosm@gmail.com

Abstract. *The paper shows the plasma process for the obtainig of nanodispersed silicon dioxide powder from high silica raw materials of 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). A unique plasma plant based on the arc of the plasma torch is used for the obtaining of silica nanopowders. To study the morphology of the nano-dispersed product obtained using the method of transmission electron microscopy. Synthesized agglomerated nanoparticles have a spherical shape and size distribution in the range of 10-300 nm.*

В настоящее время актуальным является получение нанопорошков оксидов. Одним из наиболее востребованных среди них является наноразмерный диоксид кремния, который получают различными методами: механохимическим [1], золь-гель [2], электронно-лучевым [3,4], пиролиза [5] и другими. Среди перечисленных методов рядом преимуществ обладает плазменный способ получения нанопорошков. Главным преимуществом плазмохимического способа является отсутствие температурных ограничений, которые характерны для всех остальных технологий, что позволяет интенсифицировать физико-химические процессы и обеспечивает создание продуктов требуемого химического состава, агрегатного состояния и форморазмеров. Реакции происходят с высокой скоростью, что обуславливает высокую производительность плазменных реакторов [6].

Целью работы являлось получение наноразмерного порошка диоксида кремния из высококремнеземистого природного сырья при помощи энергии низкотемпературной плазмы дугового разряда и проведение микроскопических исследований полученных продуктов.

Для получения нанопорошка SiO_2 использовалась экспериментальная плазменная установка (Рис. 1), которая состоит из: генератора низкотемпературной плазмы электродугового разряда (плазмотрона) 1, инициирующего плазменную дугу 2 внутри водоохлаждаемого реактора 3. На дне реактора расположен

графитовый тигель 4. В боковую стенку реактора через отверстие вмонтировано устройство подачи 5, состоящее из шнекового дозатора и электропривода. Сырьевой материал подается через воронку. Под действием плазмы ($T=3\div5\cdot10^3$ К) сырье сублимируется и переходит в газовую фазу, которая проходит через теплообменник в циклон, где оседает более крупная фракция. Целевой продукт осаждается в электрофильтре 8, расположенном после циклона. Вентилятор 9 направляет поток газовой фазы в системе.

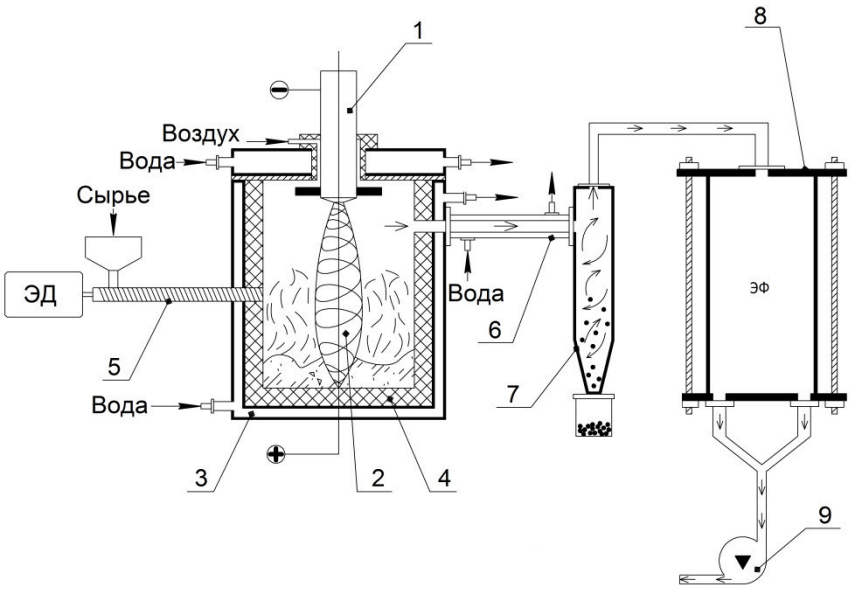
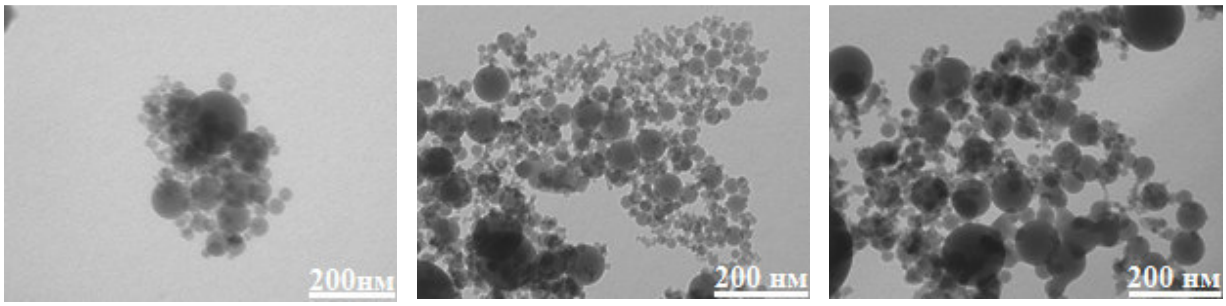


Рис. 1. Схема плазменной установки для получения нанопорошков: 1 – плазмотрон, 2 – дуга, 3 – графитовый анод, 4 – водоохлаждаемый реактор, 5 – устройство подачи сырья, 6 – теплообменник, 7 – циклон, 8 – электрофильтр, 9 – вентилятор

Принцип действия установки основан на процессах плавления, испарения и сублимации сырьевого материала под действием плазменного потока (3000-5000°С) и последующей конденсации образуемых паров в виде наночастиц целевого продукта на охлаждаемой поверхности [7,8].

В работе были использованы сырьевые материалы природного происхождения из российских месторождений, таких как диатомит Камышловского месторождения в Свердловской области, кварцит Чупинского месторождения в республике Карелия, кварцевый песок Туганского месторождения в Томской области.

Полученный на плазменной установке нанопорошок исследовали на просвечивающем электронном микроскопе СМ 12 (Philips, Нидерланды), 120 кВ. По результатам микроскопических исследований (Рис. 2) установлено, что полученные продукты имеют сферическую форму, полидисперсны, а диаметр наночастиц лежит в диапазоне 10-300 нм. Результаты исследования продуктов плазменного синтеза методом просвечивающей электронной микроскопии представлены на рисунке 2.



а) *б)* *в)*

Рис. 2. ПЭМ-изображения полученных нанопорошков диоксида кремния из различного сырья: а) кварцита, б) кварцевого песка, в) диатомита

Таким образом, проведенные исследования показали возможность применения природных высококремнеземистых материалов в качестве сырья для плазменной технологии получения наноразмерного порошка диоксида кремния. Установлено, что синтезированные плазменным способом наночастицы подвержены сильной агломерации, имеют сферическую форму, с диаметрами в диапазоне от 10 до 300 нм. Полидисперсность нанопорошка является конкурентным преимуществом в случае его применения в качестве модифицирующей добавки для изготовления строительных материалов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шабанова Н.А., Саркисов П.Д., Основы золь-гель технологии нанодисперсного кремнезема. – М: Академкнига, 2004. – 207с.
2. Rahman I.A., Vejayakumaran P., Sipaut C.S. et al., Anoptimized sol-gel synthesis of stable primary equivalent silica particles // Colloids and Surfaces.A, – 2007. – V. 294.– No. 1–3.– P. 102–110
3. Бардаханов С.П., Корчагин А.И., Куксанов Н.К., и др., Применение мощных ускорителей электроновтипа ЭЛВ для получения нанопорошков // Problems of atomic science and technology. Series: Nuclear Physics Investigations – 2008. – V.50. – № 5. – P.165-168.
4. Сазонов Р.В., Холодная Г.Е., Пономарев Д.В., Кайканов М.И., Импульсный плазмохимический синтез ультрадисперсного диоксида кремния из металлоорганического прекурсора // Изв. вузов. Физика 6/2. – 2012. – Т.55. – С. 72–76.
5. Gröhn A.J., Pratsinis S.E., Sanchez-Ferrer A. et al. Scale-up of Nanoparticle Synthesis by Flame Spray Pyrolysis: The High-Temperature Particle Residence Time // Industrial & Engineering Chemistry Research. – 2014. – V. 53. – P.10734−10742
6. Синтез дисперсных металлооксидных материалов. Книга 2. Плазмохимический метод получения оксидов титана и циркония / Под ред. Т.Д. Малиновской. – Томск: Изд-во НТЛ, 2014. –168 с.
7. Пат. 2588208 РФ, МПК C01B 33/18, B28B 3/00. Способ получения нанопорошка диоксида кремния / В.А. Власов, П.В. Космачев, Н.К. Скрипникова, Г.Г. Волокитин, О.Г. Волокитин, Безухов К.А. Заявлено 23.04.2015; Опубл. 27.06.2016, бюл. № 18. – 5 с.: ил
8. Kosmachev P., Vlasov V., Skripnikova N., Technological aspects of obtaining SiO_2 nanoparticles // AIP Conf. Proc. – 2017.– V. 1800.– P.020016-1–020016-5

МЕТОДИКА РАСЧЕТА ТЕЧЕНИЙ РАБОЧИХ ТЕЛ В ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ ТРАКТАХ ПВРД

К.В. Костюшин, А.М. Кагенов, В.А. Шувариков
Научный руководитель: к.ф.-м.н. И.В. Еремин
Национальный исследовательский Томский государственный университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050
E-mail: kostushink@niipmm.tsu.ru

CALCULATION METHOD OF GAS FLOW OF A RAMJET ENGINE

K.V. Kostyushin, A.M. Kagenov, V.A. Shuvarikov
Scientific Supervisor: I.V. Eremin
Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050
E-mail: kostushink@niipmm.tsu.ru

Abstract. *In the present study calculations algorithm of gas flow of ramjet engine are shown. The algorithm is based on the solution of two-dimensional gas dynamics equations. Calculations are done for ramjet model which consists of air intake, combustion chamber, nozzle and supersonic jet. The results in agreement with known solutions for cold blowing of ramjet gas-dynamic paths.*

Введение. В настоящее время для достижения высоких скоростей полета прорабатываются различные типы компоновки двигательных установок. Одной из таких схем является прямоточный воздушно-реактивный двигатель (ПВРД). В связи со сложностью конструкции и многообразием физико-химических процессов, протекающих в ПВРД, для получения локальных и интегральных характеристик, необходимо проведение комплексных численных расчетов течения рабочих тел в воздухозаборнике, камере сгорания, сопловом блоке и истекающей струе. В работе представлена методика и приведены результаты тестовых расчетов для модельного гиперзвукового ПВРД (ГПВРД).

Методика расчета. Алгоритм решения основан на расчете течения невязкого газа в осесимметричном приближении с использованием схемы Годунова [1,2] адаптированной к произвольному количеству граней расчетной сетки [3]. Это позволяет использовать данный алгоритм на блочно-структурированных сетках сплошным образом, без проведения дополнительных процедур по согласованию решений на границах блоков. Для вычисления потоков через грани контрольного объема используется точное решение задачи Римана о распаде произвольного разрыва.

Локальные и интегральные характеристики ПВРД имеют сильную зависимость от разнообразных физических процессов, протекающих в воздухозаборнике («внешнее» и «внутреннее» сжатие, колебание системы скачков уплотнения – «помпаж»). В свою очередь, локальные характеристики течения в воздухозаборнике зависят от ряда «внешних» и «внутренних» факторов: геометрии воздухозаборника и камеры сгорания, параметров набегающего потока, давления в камере сгорания [4]. В связи с этим, для определения характеристик ПВРД необходимо проводить расчеты не только в газодинамических трактах двигательных установок, но и во внешних областях.

В качестве тестовой геометрии была выбрана классическая схема ПВРД (Рисунок 1) включающая в себя воздухозаборник с центральным телом, камеру сгорания и сопловой блок. Для построения блочно-

структурированной сетки, расчетная область, включающая в себя газодинамический тракт ПВРД и внешнюю область, была разбита на прямоугольные подобласти (Рисунок 2). В каждой подобласти строится структурированная расчетная сетка. Стыковка расчетных сеток между подобластями проводилась с использованием алгоритма, описанного в [3]. Для примера на рисунке 3 показана часть расчетной сетки в области *A* показанной на рисунке 2.

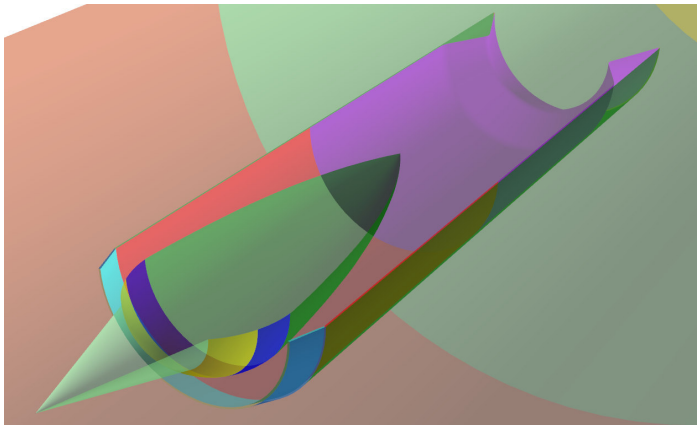


Рис. 1. Геометрия модельного ПВРД. Вид в разрезе.

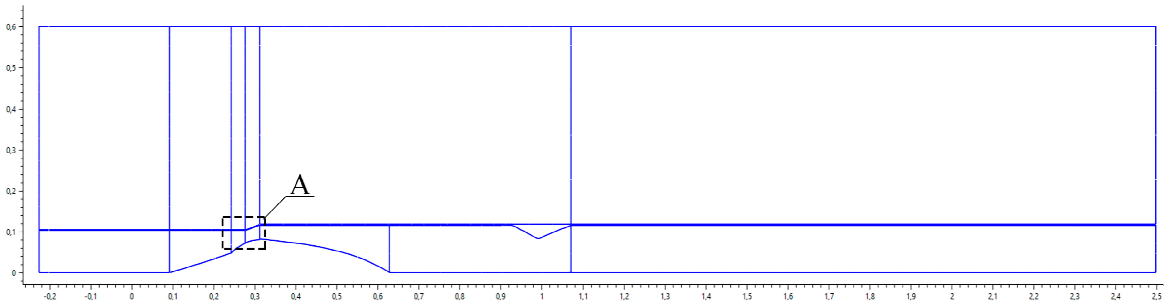


Рис. 2. Декомпозиция расчетных областей.

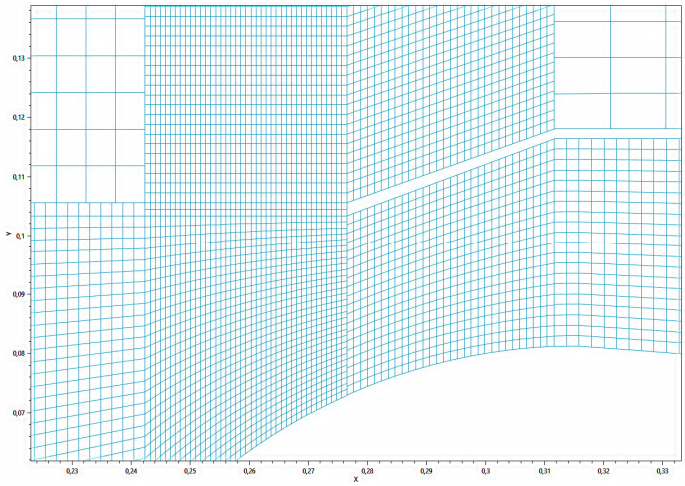


Рис. 3. Расчетная сетка в области A.

На внутренних и внешних элементах двигателя ставилось граничное условие – твердая стенка. На левой границе внешней расчетной области – сверхзвуковой вход (давление: 0,1 атм, температура: 216 K,

скорость: 6 М). На остальных внешних границах – сверхзвуковой выход. Задача решалась методом установления, с начальным распределением во всех подобластях равными параметрам набегающего сверхзвукового потока. Рабочее тело – воздух. Построение геометрии и расчетных сеток, а также проведение расчетов и визуализация результатов проводились с использованием разработанного программного комплекса «FlashFlow» [5].

Результаты расчета. На рисунке 4 показано поле чисел Маха, видно, что набегающий поток тормозится на входе в воздухозаборник. Течение газа в камере сгорания, - преимущественно сверхзвуковое, с наличием местных дозвуковых зон. Качественная картина течения соответствует известным решениям при холодной продувке газодинамических трактов ПВРД [1].

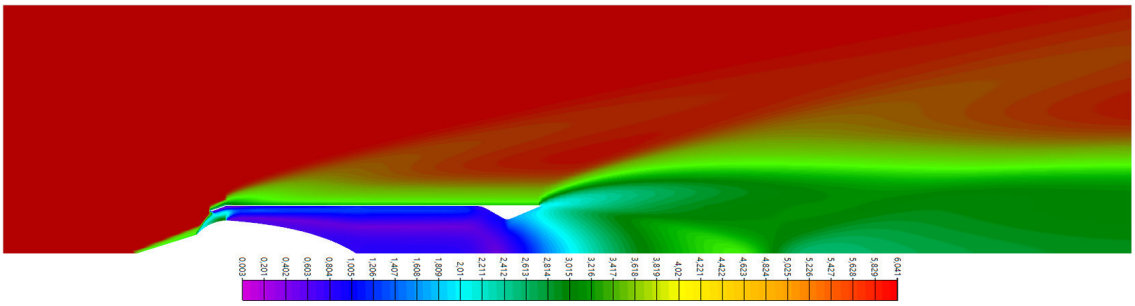


Рис. 4. Результаты расчета – поле чисел Маха.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках государственного задания, проект № 9.9063.2017/БЧ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Годунов С. К., Забродин А. В., Иванов М. Я., Крайко А. Н., Прокопов Г. П. Численное решение многомерных задач газовой динамики.– М.: Наука, 1976. – 400с.
2. Куликовский А. Г., Погорелов Н. В., Семенов А. Ю. Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. – М.: Физматлит, 2001. – Т. 607.
3. Костюшин К. В., Кувшинов Н. Е. Реализация алгоритма численного решения уравнений газовой динамики для произвольного числа граней расчетной ячейки // Сборник трудов IX всероссийской научной конференции: Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики (ФППСМ-2016) – Томск: Томский государственный университет, 2016. – 502 с.
4. Герман Р. Сверхзвуковые входные диффузоры. – М.: Издательство АН СССР, 1959. – 290 с.
5. Костюшин К.В., Кагенов А.М., Богдевич Ю.Р. Разработка программного комплекса для расчета локальных и интегральных характеристик течений продуктов сгорания в газодинамических трактах ракетных двигателей // Сборник материалов Всероссийской молодежной научно-практической конференции: «Орбита молодежи» и перспективы развития российской космонавтики». – Самара: Самарский университет, 2016. С. 190-191.

ВЛИЯНИЕ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА МИКРОСТРУКТУРУ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА 12%-НОЙ ХРОМИСТОЙ ФЕРРИТНО-МАРТЕНСИТНОЙ СТАЛИ ЭК-181

Д.А. Кравченко, Н.А. Полехина
Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент И.Ю. Литовченко
Национальный исследовательский Томский государственный университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050
E-mail: kravcdasha@yandex.ru

INFLUENCE OF THERMOMECHANICAL TREATMENT ON THE MICROSTRUCTURE AND MECHANICAL PROPERTIES OF 12% -CR FERRITIC-MARTENSITIC STEEL EK-181

D.A. Kravchenko, N. A. Polekhina
Scientific Supervisor: PhD. I.Yu. Litovchenko
Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050
E-mail: kravcdasha@yandex.ru

***Abstract**. The features of microstructure and mechanical properties of the EK-181 ferritic-martensitic steel after high-temperature thermomechanical treatment with deformation in the austenite region are investigated. It is shown that as a result of the treatment, the volume fraction of nanosized vanadium carbonitride particles V (C, N) and the dislocation density increase significantly. This modification of the structure leads to an increase in the yield strength of the steel up to 468 MPa at 650 °C.*

Введение. Одним из приоритетных направлений реакторного материаловедения является разработка малоактивируемых 12%-ных хромистых ферритно-мартенситных сталей, для использования их в качестве материалов активных зон и внутрикорпусных устройств ядерных и термоядерных энергетических реакторов новых поколений [1–3]. Для расширения рабочего температурного диапазона таких сталей, во-первых, необходимо дополнительное повышение их высокотемпературной прочности, во-вторых, снижение температуры вязко-хрупкого перехода.

Одним из способов повышения прочности сталей является высокотемпературная термомеханическая обработка (ВТМО), которая включает деформацию в аустенитной области. В настоящей работе исследовано влияние ВТМО на особенности микроструктуры и механические свойства стали ЭК-181 (RUSFER-EK-181).

Материалы и методы исследования. Исследования проводили на образцах жаропрочной ферритно-мартенситной 12%-ных хромистой стали ЭК-181 (Fe-11.17%Cr-1.13%W-0.74%Mn-0.25%V-0.16%C), ВТМО заключалась в нагреве до T = 1100 °C с выдержкой 1 ч., горячей пластической деформации прокаткой до величины ε ≈ 30 – 60 % (прокатный стан находился при комнатной температуре; температура образца на выходе из стана была не ниже ≈ 650 °C) и последующей закалке в воду.

Механические испытания на растяжение проводили при T = 20 °C, а также при T = 650 °C в вакууме ~ $3 \cdot 10^{-3}$ Па. Образцы имели форму двусторонних лопаток с размерами рабочей части

~ 13×2×1 мм. Структурные исследования проводили на просвечивающем электронном микроскопе 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. Электронно-микроскопические исследования показали формирование высокой плотности наноразмерных (5-10 нм) частиц карбонитрида ванадия V(C, N) (рис. 1) непосредственно после ВТМО. Указанные частицы образуются в аустенитной фазе, так как их выделение в температурном интервале существования мартенсита (ниже ~ 400 °С) невозможно. В условиях традиционной термической обработки (ТТО – закалка и отпуск) эти частицы формируются в процессе отпуска (720 °С, 3ч). Отпуск после ВТМО приводит к коагуляции наночастиц карбонитрида ванадия V(C, N) и некоторому уменьшению их плотности, тем не менее, их размеры не превышают ~ 10 нм (рис. 2). Более высокая степень деформации (ε ≈ 60 %) способствует повышению плотности дислокаций и наноразмерных частиц V(C, N) в мартенситной структуре. Значительная плотность дефектов и выделившихся на них наноразмерных частиц сохраняется и в процессе отпуска (720 °С, 1ч).

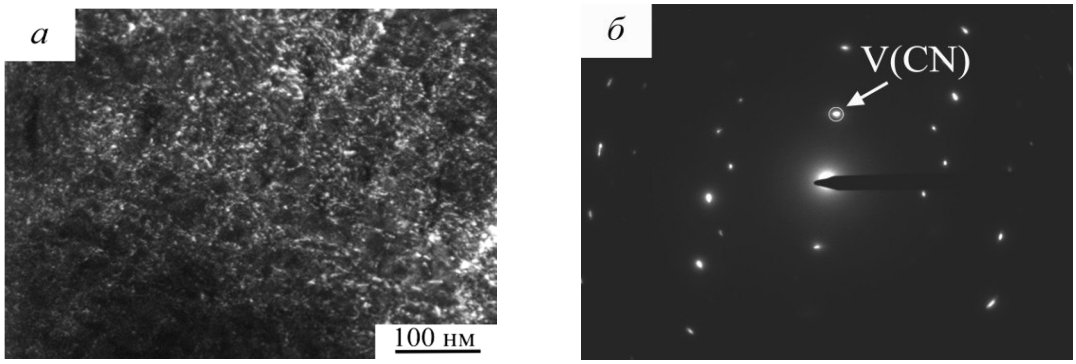


Рис. 1. Темнопольное изображение в рефлексе карбонитрида V(C, N) (а) и соответствующая микродифракционная картина (б) стали ЭК-181 после ВТМО без отпуска с деформацией в аустенитной области ε ≈ 30 %

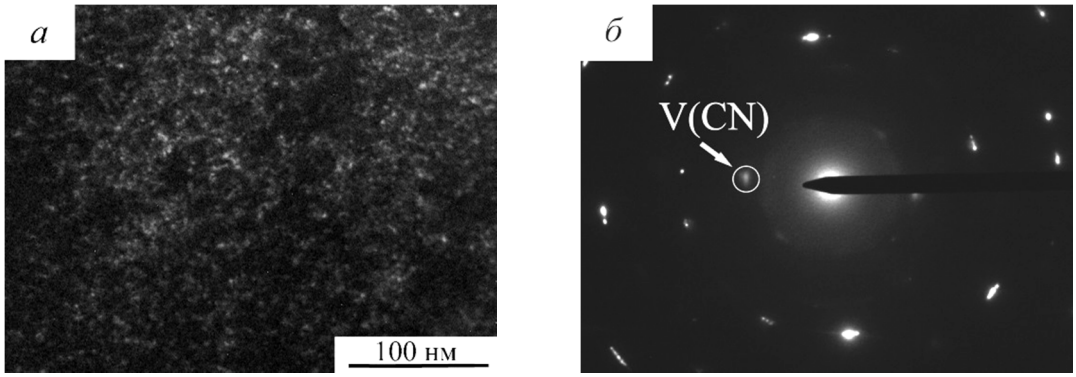


Рис. 2. Темнопольное изображение в рефлексе карбонитрида V(C, N) (а) и соответствующая микродифракционная картина (б) стали ЭК-181 после ВТМО с отпуском и деформацией в аустенитной области ε ≈ 60 %

Механические испытания на растяжение показали, что внесенная пластическая деформация приводит к значительному повышению прочностных свойств стали ЭК-181, по сравнению с ТТО, как при комнатной, так и при повышенной (T = 650 °C) температуре испытаний (Таблица 1). Высокая степень деформации в процессе ВТМО позволяет получить максимальные (до 468 МПа) значения предела текучести стали (при T = 650 °C) после отпуска при относительном удлинении 9,2 %.

Таблица 1.

Механические свойства стали ЭК-181

Режим обработки	Температура испытаний			
	T = 20 °C		T = 650 °C	
	Предел текучести, МПа	≈ δ, %	Предел текучести, МПа	≈ δ, %
ТТО	650–710	6,3	290–296	8,6
ВТМО ε ≈ 30 %	1424–1486	5,5	430–435	7,0
ВТМО ε ≈ 30 %+ отпуск 1 ч.	896–942	8,8	352–398	10,2
ВТМО ε ≈ 60 %	1340-1466	6,2	554-767	5,5
ВТМО ε ≈ 60 %+ отпуск 1 ч.	770-851	5	445-468	9,2

Заключение. Показаны возможности высокотемпературной термомеханической обработки в аустенитной области ферритно-мартенситной стали ЭК-181 в повышении кратковременной высокотемпературной прочности. В процессе отпуска после ВТМО значительная плотность дефектов и выделившихся на них наноразмерных частиц сохраняется. Это приводит к повышению эффективности дисперсного и субструктурного упрочнения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hollner S., Piozin E., Mayr P., Caës C., Tournié I., Pineau A., Fournier B. Characterization of a boron alloyed 9Cr3W3CoVNbBN steel and further improvement of its high-temperature mechanical properties by thermomechanical treatments // Journ. Nucl. Mater. – 2013. – V. 441. – P. 15–23.
2. Klueh R.L., Hashimoto N., Maziasz P.J. New nano-particle-strengthened ferritic/martensitic steels by conventional thermo-mechanical treatment // Journ. Nucl. Mater. 2007. – V. 367–370. – P. 48–53.
3. Litovchenko I. Yu., Polekhina N. A., Tyumentsev A. N., Astafurova E.G, Chernov V. M., Leontyeva–Smirnova M.V. The effect of heat treatment on the microstructure and mechanical properties of heat-resistant ferritic–martensitic steel EK-181 // Journ. Nucl. Mater. 2014. – V. 455. – P. 48–53.

МОДИФИЦИРОВАНИЕ ПЛЕНОК ИЗ ПОЛИМОЛОЧНОЙ КИСЛОТЫ ПЛАЗМОЙ АТМОСФЕРНОГО ДАВЛЕНИЯ

В.Л. Кудрявцева, Э.В. Киблер,
Научный руководитель: доцент, к.ф-м.н. С.И. Твердохлебов
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050
E-mail: kudr.valeriya@gmail.com

ATMOSPHERIC PRESSURE PLASMA TREATMENT OF PLLA FILMS

V.L. Kudryavtseva, E.V. Kibler
Scientific Supervisor: ass. prof., Dr. S.I. Tverdokhlebov
Tomsk Polytechnic University, 30 Lenin Avenue, Tomsk 634050, Russian Federation
E-mail: kudr.valeriya@gmail.com

***Abstract**. The effect of atmospheric pressure plasma treatment on properties of polylactic acid films was investigated. Modification was performed in the system for the formation of self-sustained volume discharge with following parameters: pulse voltage 20 kV, pulse energy 0.3 J, pulse repetition frequency 500 Hz, pulse duration 120 ns. Properties of the films were examined by means of wettability analysis and atomic force microscopy. It was shown that plasma treatment change surface morphology and significantly increasing hydrophilicity of scaffolds.*

На сегодняшний день полимерные материалы находят широкое применение во многих областях таких как, строительство, машиностроение, микроэлектронике, медицина и т.д. Не смотря на активное использование полимеров, существуют проблемы, ограничивающие потенциал данных материалов. Как правило, полимерные материалы характеризуются низкими значениями поверхностной энергии, что обуславливает плохую смачиваемость, недостаточную адгезию и т.п.

Одним из наиболее перспективных методов, позволяющих решить данные проблемы, является плазменная обработка, которая дает возможность изменить поверхностные свойства полимерных материалов в широких пределах и значительно расширить области их применения [1-2]. Холодная плазма позволяет безопасно, быстро и эффективно осуществить стерилизацию теплочувствительных материалов без использования токсических химических веществ.

Большинство полимеров, применяемых для изготовления имплантатов гидрофобны, что затрудняет прикрепление клеток к их поверхности. Управляемая гидрофилизация поверхности полимеров является актуальной задачей. На сегодняшний день существует множество способов гидрофилизации полимерных поверхностей, одним из которых является обработка в неравновесной газоразрядной плазме [3]. Плазменная обработка изменяет поверхностную энергию полимера и, как следствие, приводит к улучшению смачиваемости и стимулирует образование свободных радикалов [4].

Материалы и методы

Для формирования тонких полимерных пленок использовали 1% раствор поли-L-молочной кислоты PL38 (PURAC, Нидерланды) в хлороформе (Fisher Chemical, USA). После гомогенизации раствора в течение 12 часов его в количестве 15±1 г наливали в чашку Петри и оставляли до полного

испарения растворителя на 72 часа. Толщина полученных пленок составляла 35±3 мкм. Модифицирование осуществлялось воздействием плазмы объёмного самостоятельного разряда на поверхность пленок. Объемные самостоятельный разряд генерировался источником плазмы атмосферного давления [5]. Образцы крепились к аноду электродной системы. Для обработки пленок использовался режим со следующими параметрами: частота следования импульсов 500 Гц, напряжения импульса 20 кВ, длительность импульса 120 нс, энергия в импульсе 0,3 Дж.

Смачиваемость поверхности полученных образцов исследовали на установке «EasyDrop» (Krüss, Германия) методом «сидячей» капли (объем капли 3 мкл), помещенной на исследуемую поверхность, путем измерения краевого угла смачивания. Результаты исследования смачиваемости поверхности от времени обработки представлены в таблице 1.

Исследование поверхности пленок было проведено с использованием атомно-силового микроскопа (АСМ) «Solver-HV» (NT-MDT). Измерения были проведены на воздухе при нормальных условиях в полуконтактном режиме работы. Для работы в полуконтактном режиме использовался кантилевер марки NSG11 с радиусом закругления острия иглы 10 нм и концентрацией легирующей примеси 5×10^{20} $см^{-3}$. Обработку полученных изображений проводили с использованием программного обеспечения Gwiddion 2.31 и ImageJ 1.45.

Результаты и обсуждение

Таблица 1

Значения углов смачиваемости водой.

Образец/время обработки	Угол смачиваемости, °	Поверхностная энергия, мДж/м^2	Дисперсная составляющая, мДж/м^2	Полярная составляющая, мДж/м^2
Исходный	71,1±1,68	33,93±1,09	18,16±0,61	15,76±0,48
20 секунд	54,23±1,28	45,34±0,99	14,70±0,46	30,64±0,53
60 секунд	50,73±1,35	46,40±0,70	8,97±0,24	37,43±0,46
120 секунд	42,5±3,21	59,32±2,54	5,30±0,72	54,03±1,82

Как видно из таблицы 1, модифицирование в плазме атмосферного давления приводит к увеличению смачиваемости поверхности и увеличению поверхностной энергии, что объясняется активным образованием свободных радикалов на поверхности полимерного материала вследствие воздействия плазмы.

Исследование поверхности образцов методом атомно-силовой микроскопии демонстрирует изменение рельефа, и, как следствие, изменение шероховатости поверхности пленок.

Таблица 2

Значения шероховатости поверхности.

Образец/время обработки	R_a, нм
Исходный	0,3±0,15
20 секунд	3,97±0,73
60 секунд	7,14±1,44
120 секунд	7,06±0,36

Как видно из рисунка 1а, поверхность исходного образца по сравнению с модифицированными образцами гладкая с шероховатостью равной 0,3±0,15 нм. В таблице 2 показано, что при увеличении времени обработки плазмой шероховатость поверхности увеличивается. Из рис. 1 видно, что при обработке пленок из полимолочной кислоты плазмой атмосферного давления происходит образование микрометрических структур, что обусловлено травлением поверхности [6].

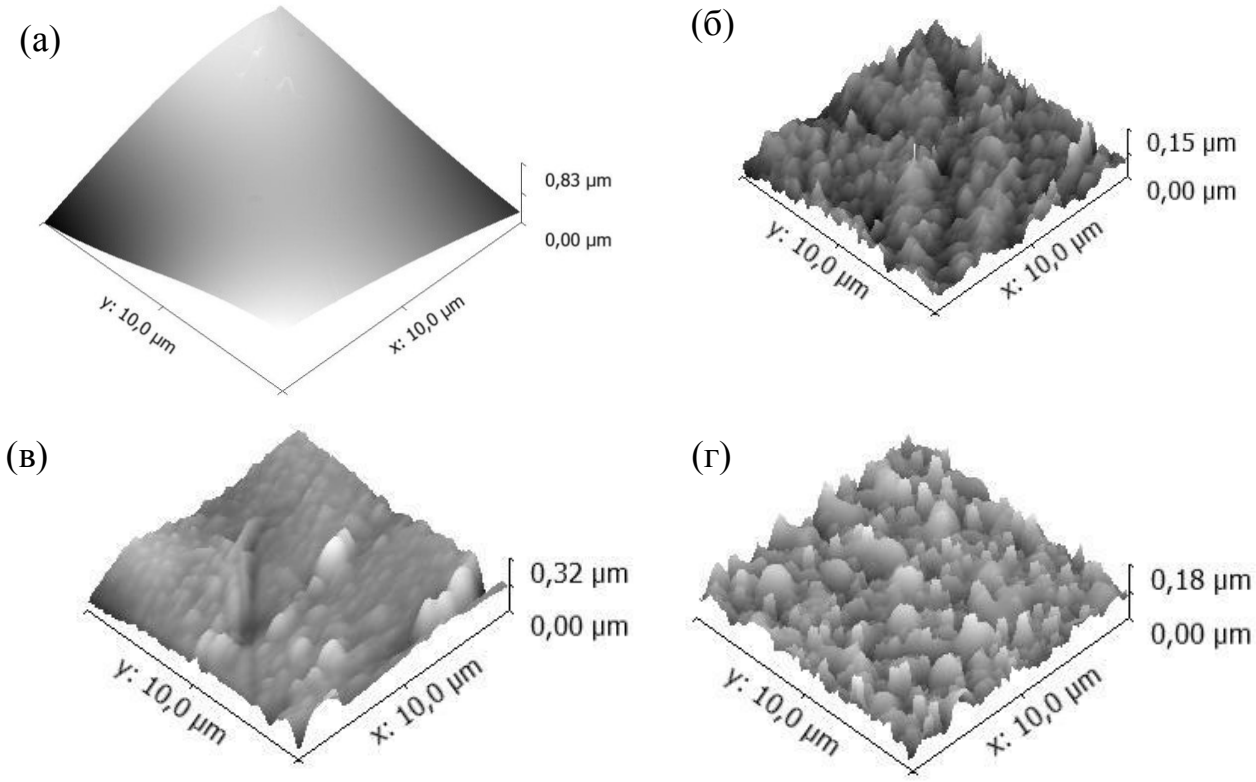


Рис. 1. АСМ изображения поверхности а) исходного образца и образцов, обработанных плазмой в течение б) 20 с, в) 60 с, г) 120 с.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bhardwaj N., Kundu S.C. Electrospinning: a fascinating fiber fabrication technique // Biotechnology advances. – 2010. – V. 28. – N. 3. – P. 325-347.
2. Chu P. K. et al. Plasma-surface modification of biomaterials //Materials Science and Engineering: R: Reports. – 2002. – Т. 36. – №. 5. – С. 143-206.
3. Desmet T. et al. Nonthermal plasma technology as a versatile strategy for polymeric biomaterials surface modification: a review // Biomacromolecules. – 2009. – Т. 10. – №. 9. – С. 2351-2378.
4. Медведев Д. Д. и др. Плазмообразующие полимерные среды для инерциального термоядерного синтеза и биоинженерии // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Термоядерный синтез. – 2010. – Т. 1. – С. 22-31.
5. Zhuravlev, M. V., Remnev G. E., Shubin B. G. Volume Self-Sustained Discharge in Atmospheric Pressure Gas with High Pulse Repetition Frequency // Applied Mechanics & Materials . –2015 – V. 756.
6. Egitto F. D., and Matienzo L. J. Plasma modification of polymer surfaces for adhesion improvement // IBM Journal of Research and Development. –1994 – V. 38. – N4. – P. 423-439.

АНАЛИЗ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ ПОЛОСЫ ν_{11} МОЛЕКУЛЫ $^{13}C_2H_4$

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 $^{13}C_2H_4$ MOLECULE: THE ν_{11} 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)×10^{-4} cm^{-1}, ro-vibrational spectra of the $^{13}C_2H_4$ molecule in the region of 2900 - 3050 cm^{-1} were recorded for the first time with Fourier transform interferometers Bruker IFS 120 HR and analyzed.*

Введение. На современном этапе развития науки о микромире вся точная количественная и качественная информация о молекулах, как физических объектах, извлекается спектроскопическими методами из анализа электромагнитных спектров молекул. 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].

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 $^{13}C_2H_4$ полосы ν_{11}.

Общая характеристика молекулы $^{13}C_2H_4$. В этом исследование наше внимание сосредоточено на изотопологе этилена – $^{13}C_2H_4$. Группа симметрии молекулы $^{13}C_2H_4$ изоморфна группе D_2h и имеет 8 неприводимых представлений [3]. Центр полосы составляет 2969,6024см$^{-1}$.

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]:

$$H^n = E^n + \left[A^n - \frac{1}{2}(B^n + C^n)\right]J_z^2 + \frac{1}{2}(B^n - C^n)J^2 + \frac{1}{2}(B^n + C^n)J_{xy}^2 - \Delta_K^n J_z^4 - \Delta_{JK}^n J_z^2 J^2 - \Delta_J^n J^4 - \delta_K^n\left[J_z^2, J_{xy}^2\right] - 2\delta_J^n J^2 J_{xy}^2 + H_K^n J_z^6 + H_{KJ}^n J_z^4 J^2 + H_{JK}^n J_z^2 J^4 + H_J^n J^6 + \left[J_{xy}^2, h_K^n J_z^4 + h_{JK}^n J^2 J_z^2 + h_J^n J^4\right] + L_K^n J_z^8 + L_{KKJ}^n J_z^6 J^2 + L_{JK}^n J_z^4 J^4 + L_{JJK}^n J_z^2 J^6 + L_J^n J^6 + \left[J_{xy}^2, l_K^n J_z^6 + l_{KJ}^n J_z^4 J^2 + l_{JK}^n J_z^2 J^4 + l_J^n J^6\right] + \cdots \quad (1)$$

Равновесная конфигурация молекулы и фундаментальное колебание ν_{11} представлены на рисунке 1 и 2, соответственно.

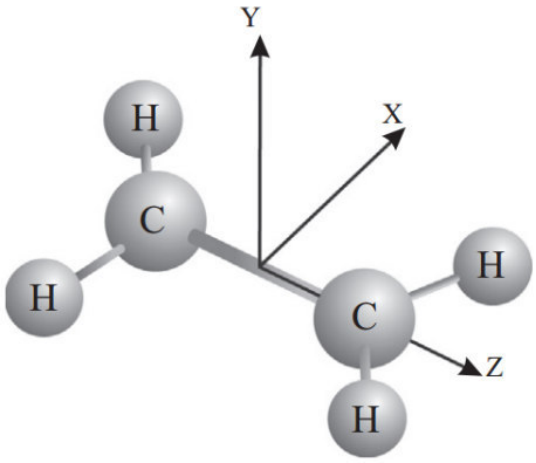


Рис. 1 – Равновесная конфигурация молекулы

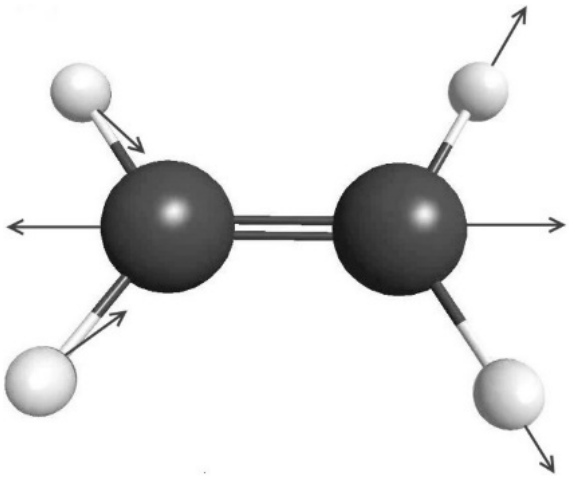


Рис. 2 – Фундаментальное колебание ν_{11}

Исследуемый диапазон спектра (рисунок 3) в области 2906 - 3007 cm^{-1} был снят на Фурье-спектрометре IFS-120HR в Техническом университете Брауншвейга (Брауншвейг, Германия). Спектры зарегистрированы при давлении 200 Па с эффективной длиной поглощения 8 м в течение 19,9 часов. Спектр представлен на рисунке 3.

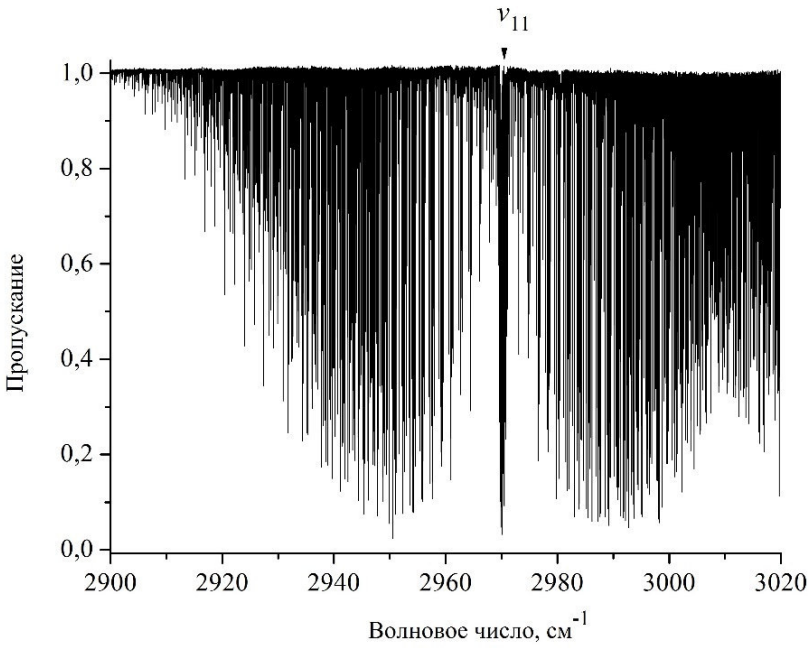


Рис. 3 – Спектр молекулы $^{13}C_2H_4$

Результаты анализа спектра высокого разрешения. Исследуемая полоса ν_{11} принадлежит группе симметрии *A*-типа и имеет следующие правила отбора: $\Delta J = 0, \pm1$; $\Delta K_a = 0, \pm2$; $\Delta K_c = 0, \pm2$. Информация об энергетических уровнях основного колебательного состояния была получена из работы [5]. В результате работы был проинтерпретирован спектр молекулы $^{13}C_2H_4$ в районе полосы ν_{11}. (максимальное значение квантового числа $J = 35$ и максимальное значение квантового числа $Ka = 16$. В ходе работы было проинтерпретировано около 1650 и определенно 660 энергий для возбужденного состояния ν_{11}. 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., HerasA.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 $13C_2H_4$: 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 C2H4: Re-analysis of the ground state and v4, v7, v10, and v12 vibrational bands // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Tansfer. – 2013. – V. 118. – P. 14-25.

РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ ТЕЧЕНИЯ ГАЗА В КАНАЛАХ С ШЕРОХОВАТОЙ СТЕНКОЙ

М.А. Кузнецов

Научный руководитель: профессор, д.т.н. В.И. Токманцев

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,

Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19, 620002

E-mail: maxbsp@mail.ru

COMPUTATION OF GAS FLOW PARAMETERS IN CHANNELS WITH ROUGH WALL

M.A. Kuznetsov

Scientific Supervisor: Prof., Dr. V.I. Tokmantsev

Ural Federal University, Russia, Yekaterinburg, Mira str., 19, 620002

E-mail: maxbsp@mail.ru

Abstract. *In this paper gas flow parameteers in channels with rough wall are calculated. Computation was performed using direct simulation Monte Carlo method. Effect of wall microstructure on flow parameters is considered. Simulation of gas relaxation process in channel with presure difference is carried out.*

Введение. Определение параметров газового потока в микроканалах, имеющих сложную геометрию, является актуальной задачей молекулярной физики. Решение данной задачи может быть применимо при проектировании летательных аппаратов, систем охлаждения, микроэлектромеханических систем (MEMS) и приборов точного измерения давления.

Учет геометрии канала и микроструктуры его поверхности имеет особое значение в свободномолекулярном и промежуточном режимах течения, поскольку в этих режимах течения вероятность столкновения между частицами относительно мала. Частицы в большинстве случаев передвигаются беспрепятственно от одной стенки системы до другой. В таких условиях существенное влияние на параметры течения оказывает взаимодействие частиц с поверхностью [1].

Математическая модель. В данной работе проводится трехмерное моделирование свободномолекулярного течения газа в микроканале с учетом шероховатости стенки. Расчет производится методом прямого статистического моделирования по методике, предложенной Бердом [2] с некоторыми изменениями для учета микрошероховатой поверхности. В расчете использовалось 10^7 модельных частиц. В начале численного эксперимента на концах канала устанавливается заданная разница давлений и температур. Затем ведется расчет на пространственной сетке с шагом по времени Δt. Внутри канала, а также, первой и второй зон строится трехмерная прямоугольная сетка, в каждой ячейке которой вычисляются осредненные за время Δt макроскопические параметры потока – числовая плотность и макроскопическая скорость. Температура на стенке в ходе всего расчета поддерживается при заданном значении. В зоне 1 температура задается как T_1, в зоне 2 – T_2. На поверхности канала поддерживается линейный градиент температуры от значения T_1 до значения T_2.

Моделируемая система условно делится на три зоны (рис. 1): зона 1 (входная зона), зона 2 (выходная зона), зона канала. В каждой зоне выделяются поверхности, с которыми может происходить столкновение. На рисунке 1 номерами обозначены поверхности: 1 - цилиндрическая поверхность,

ограничивающая зоны 1 и 2; 2 и 3 – левая и правая стенки зоны 1 и 2 соответственно; 4 и 5 – правая и левая стенки с отверстием зон 1 и 2 соответственно; 6 – поверхность канала.

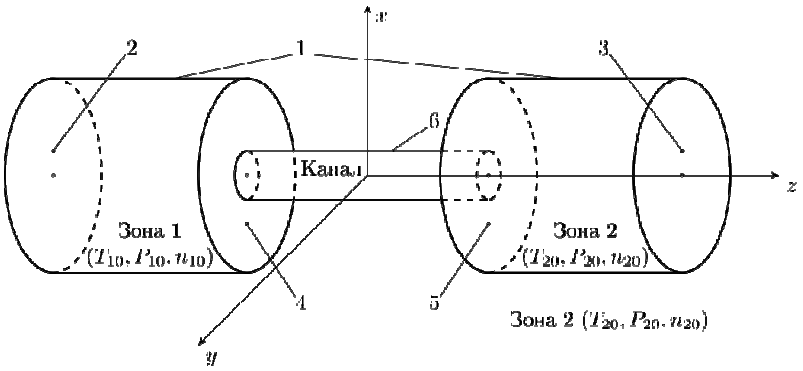


Рис. 1. Геометрия модельной системы

В начальный момент времени частицы в каждой из зон распределяются равномерно по всему объему зоны, в соответствии со значением числовой плотности в данной зоне. Скорости частиц разыгрываются как случайные векторные значения, удовлетворяющие функции распределения Максвелла. Компоненты скоростей частиц подчиняются вероятностному закону с функцией плотности вероятности вида:

$$f(v_i) = \sqrt{\frac{m}{2\pi kT}} \exp\left[\frac{-mv_i^2}{2kT}\right]$$

В качестве характеристики шероховатости канала использовалась относительная высота микронеровности $h = \overline{h} / R$, где $\overline{h}$ - средняя высота неровностей образца, R - радиус цилиндрического канала [3].

В данном исследовании применяется диффузно-зеркальная модель рассеяния на стенке. Модель принимает допущение, что некоторая часть из всех отраженных частиц рассеивается диффузно, остальные – зеркально. Вводится параметр ε – доля диффузно рассеянных частиц. Значение ε задается перед началом расчета и может находиться в пределах от 0 до 1. Модуль новой скорости при отражении от стенки разыгрывается случайно, в соответствии с законом распределения Максвелла по модулю скорости [4].

Микроструктура поверхности стенки канала моделируется на основе данных, полученных экспериментальным путем методами атомно-силовой микроскопии с реальных образцов кремния. В работе были использованы данные атомно-силовой микроскопии кремниевого образца размером (20×20) мкм с высотой микронеровностей от 0 до ~ 2000 нм.

Результаты. При помощи метода прямого статистического моделирования были получены профили числовой плотности вдоль оси z при перепаде температуры на концах цилиндрического канала. Значения входных параметров представлены в таблице 1. На рисунке 2 приведен график изменения числовой плотности вдоль оси цилиндра при релаксации системы в трех временных точках. Относительная погрешность приведенных данных составляет 5%. На рисунке изображены 3 графика, по которым можно проследить процесс релаксации системы. Поскольку система не обменивается частицами с внешней средой, в первой и второй зонах происходит постепенное выравнивание давления.

Из графика видно, что процесс выравнивания имеет определенный предел, что является следствием эффекта термомолекулярной разности давлений.

Таблица 1

Модельные параметры для изучения процесса релаксации системы

Параметр	Значение	Единица измерения
N	$5 \cdot 10^7$	шт.
T_{10}	500	K
$P_{10}=P_{20}$	$1 \cdot 10^{-3}$	мм рт. ст.
T_{20}	100	K
ε	1	-
m	4,0026	а.е.м.
r	$0{,}2 \cdot 10^{-9}$	м
Δt	$6{,}009 \cdot 10^{-6}$	с
λ	$72{,}84 \cdot 10^{-3}$	м
$R_{канала}$	$0{,}7284 \cdot 10^{-3}$	м
$L_{канала}$	$2{,}914 \cdot 10^{-3}$	м

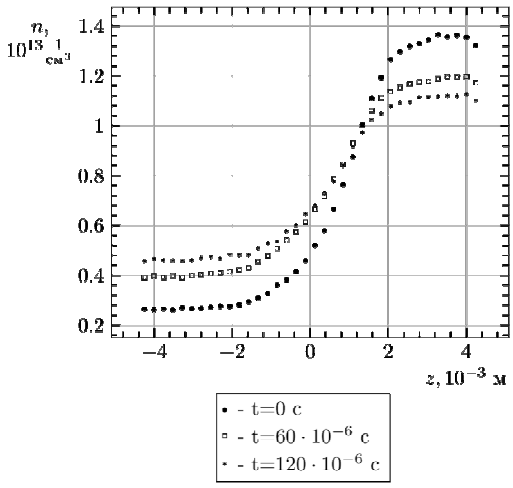


Рис. 2. График изменения числовой плотности вдоль оси канала при релаксации системы в трех временных точках

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Саксаганский Г.Л. Молекулярные потоки в сложных вакуумных структурах / Г.Л. Саксаганский. – М.: Атомиздат, 1980. – 216 с.
2. Берд, Г. Молекулярная газовая динамика / Г. Берд – М.: Мир, 1981. 319с.
3. Породнов, Б.Т. Разработка пакета прикладных программ расчёта проводимостей и распределений газодинамических параметров в различных элементах вакуумных систем при произвольном режиме течения / Б.Т. Породнов и др – Екатеринбург: УГТУ-УПИ. Отчет по НИР № 52/16/3226, 2004. 40с.
4. Ухов А.И., Породнов Б.Т., Борисов С.Ф. Аккомодация энергии гелия на чистой и частично заполненной адсорбатом поверхности вольфрама // Перспективные материалы. Специальный выпуск №8. Февраль 2010. С. 42-48.

ЭФФЕКТИВНОСТЬ МЕХАНИЧЕСКИХ ТРЕНИРОВОК ДЛЯ НАВЕДЕНИЯ ДВУСТОРОННЕГО ЭФФЕКТА ПАМЯТИ ФОРМЫ В ГЕТЕРОФАЗНЫХ МОНОКРИСТАЛЛАХ $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$ (ат. %)

Н.Г. Ларченкова, Е.Е. Тимофеева, А.Б. Тохметова
Научный руководитель: доцент, д.ф.-м.н. Е.Ю. Панченко; проф., д.ф.-м.н. Ю.И. Чумляков
Национальный исследовательский Томский государственный университет,
Россия, г.Томск, пр. Ленина, 36, 634050
E-mail: vetnat23@gmail.com

EFFECTIVENESS OF MECHANICAL TRAININGS FOR TWO-WAY SHAPE MEMORY EFFECT IN HETEROPHASE $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$ (at. %) SINGLE CRYSTALS

N.G. Larchenkova, E.E. Timofeeva, A.B. Tokhmetova
Scientific Supervisor: Dr. Sci., docent, E.Y. Panchenko, Dr. Sci., professor, Y.I. Chumlyakov
Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050
E-mail: vetnat23@gmail.com

Abstract. *The effect of mechanical trainings (loading/unloading under constant temperature and cooling/heating under applied stress) on two-way shape memory in [001]-oriented $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$ (at. %) single crystals was investigated. It was experimentally shown, that in single crystals after the stress-induced aging at 1373 K, 25min. + 673 K, 4 h followed by the training (cooling/heating at constant applied stress 80 MPa), the two-way shape memory effect with the maximum strain of 4.5 % is realizes. Its value is greater on 3,0 % in comparison with the single crystals after the stress-free aging at 1373 K, 25min. + 673 K, 4 h. The 100 cycles of loading/unloading training at room temperature in comparison with the isobaric training leads to the increase of both reversible strain on 0.5-1.0 % and thermal hysteresis in aged single crystals.*

Введение. В настоящей работе представлено исследование влияния механических тренировок на двусторонний эффект памяти формы (ДЭПФ) − величину обратимой деформации, термический гистерезис, в монокристаллах $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$ (ат. %). Исходя из того, что ДЭПФ проявляется благодаря внутренним дальнодействующим полям напряжений, которые способствуют проявлению ориентированного варианта мартенсита [1-3], в работе представленной нами ранее [3], впервые были выяснены условия для проявления ДЭПФ на монокристаллах $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$. По результатам проделанной работы на монокристаллах $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$ был получен ДЭПФ величиной обратимой деформации 0,5 % после следующей термической обработки: 1373 К, 25 мин. (закалка), и 673К, 30 мин. под нагрузкой $\sigma = 100$ МПа (охлаждение в печи). Сочетание данной обработки и механической тренировки, заключающейся в термоциклировании через интервал мартенситных превращений (МП), привело к получению ДЭПФ с максимальной величиной обратимой деформации $\varepsilon_{TWSME} = 4{,}5$ % [3]. Однако после данной термомеханической тренировки не был достигнут максимальный ресурс деформации превращения 6,3 %. Чтобы увеличить обратимую деформацию при ДЭПФ можно использовать другой вид механической тренировки − нагрузка/разгрузка при постоянной температуре, влияние которой на ДЭПФ в монокристаллах $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$ изучено не было. Поэтому целью данной

работы является исследование влияния термомеханических тренировок на ДЭПФ в гетерофазных [001]-монокристаллах сплава $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$.

Методика эксперимента. Монокристаллы $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$ (ат. %) выращивали по методу Бриджмена в атмосфере инертного газа. Образцы, ориентированные вдоль [001]-направления, для испытаний при сжатии имели форму параллелепипедов (3×3×6) мм^3. Для исследования были выбраны структурные состояния с ориентированным и неориентированным расположением дисперсных частиц γ'- фазы: 1) отжиг 1373К, 25 мин., закалка + старение 673 К, 4 ч. в свободном состоянии – состояние I; 2) отжиг 1373К, 25 мин., закалка + старение 673 К, 4 ч. под нагрузкой 100 МПа вдоль [123]-направления – состояние II. Изобарические испытания для измерения ЭПФ и ДЭПФ проводили на специально разработанной установке при охлаждении/нагреве под постоянной нагрузкой, с погрешность измерений 0,3%. Изотермические испытания выполнены на установке Instron 5969 при нагрузке/разгрузке (100 циклов при комнатной температуре $T_к$).

Результаты эксперимента. Оптические и электронномикроскопические исследования показали, что в состоянии I и II выделяются крупные некогерентные частицы γ-фазы размерами 5-10 мкм, и мелкие дисперсные частицы γ'- фазы 10-30 нм. [1,3]. Различие двух структурных состояний состоит в том, что в состоянии II частицы γ' - фазы вытянуты вдоль одного из направлений типа <111>, а в состоянии I при старении в свободном состоянии выделяются четыре кристаллографических варианта частиц, вытянутых вдоль четырех направлений типа <111> [4]. От ориентированных частиц в состоянии II образуются однородные дальнодействующие поля напряжений, которые и способствуют проявлению ДЭПФ с величиной обратимой деформации 0,5 % сразу после термической обработки в отличие от состояния I [3]. Для увеличения величины обратимой деформации в состоянии II и наведения ДЭПФ в состоянии I требуются дополнительные механические тренировки [3-5]. В данной работе представлены два вида механических тренировок: 1) термоциклирование через интервал мартенситных превращений под нагрузкой – изобарическая тренировка (рис. 1а); 2) 100 циклов нагрузка/разгрузка при $T_к$ – изотермическая тренировка (рис. 1б). После изобарической тренировки при 40 МПа в состоянии I наблюдается ДЭПФ с максимальной величиной деформации 1,5 % и увеличение напряжений от 40 МПа до 80 МПа не приводит к дальнейшему росту обратимой деформации. В состоянии II после тренировки

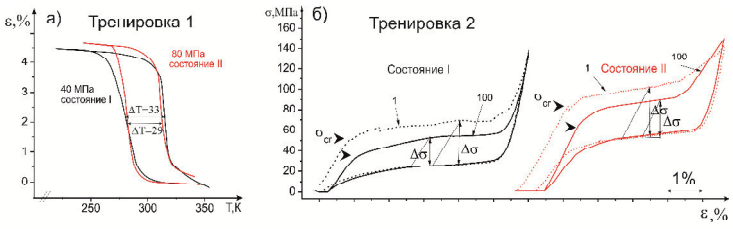


Рис. 1. Механические тренировки, необходимые для получения максимальных экспериментальных значений обратимой деформации при проявлении ДЭПФ в состояниях I и II: а) изобарическая тренировка б) изотермическая тренировка при T = 296 K

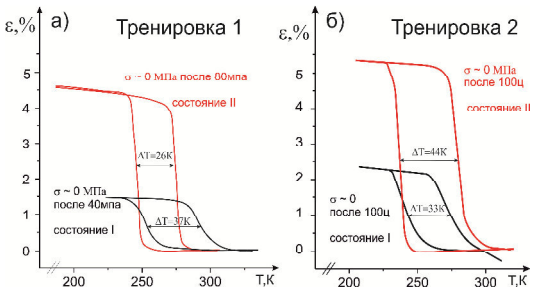


Рис. 2. ДЭПФ для монокристаллов $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$ в состояниях I и II а) после изобарической тренировки б) после изотермической тренировки

при 80 МПа величина ДЭПФ достигает 4,5 % (рис. 1а). Различие величин обратимой деформации в состоянии I и II, как было показано в работах [3,5], связано с ориентированным ростом частиц γ' - фазы в состоянии II, которые приводят к дальнодействующим полям напряжений наряду с полями напряжений от дефектов и дислокаций, возникших в процессе изобарической тренировки. В состоянии II МП обладает взрывным характером, т.е. протекает с узким интервалами прямого и обратного МП T_{MS-Mf} = 15 К и узким температурным гистерезисом ΔT_{II}^{1} = 26 К, по сравнению с состоянием I, где T_{MS-Mf} = 23 К ΔT_{I}^{1} = 37 К (рис. 2а). На рисунке 2б представлен ДЭПФ после изотермической тренировки. После изотермической тренировки в состоянии II величина ДЭПФ достигает 5,0 % и обнаружено увеличение термического гистерезиса на 18 *K*, а в состоянии I величина ДЭПФ 2,5 % остается в 2 раза меньше, чем в состоянии I и гистерезис практически не изменяется, по сравнению с изобарической тренировкой (рис. 2а). Увеличение обратимой деформации может быть связано с тем, что, во-первых, количество циклов при изотермической тренировке значительно больше, чем при изобарической тренировке. Во-вторых, напряжения в цикле при изотермической тренировке достигают 140 МПа, тогда как напряжения при изобарической тренировке не превышают 80 МПа. В-третьих, при изобарической тренировке, возможно образование некоторой объёмной доли самоаккомодирующей структуры мартенсита, о чем свидетельствует обратимая величина деформации 4,5 %, которая является меньше ресурса деформации превращения 6,3 %. При этом, при изотермической тренировке в каждом цикле достигается стадия упругой деформации мартенсита, это означает, что МП прошло полностью и во всем объеме образца возник ориентированный вариант мартенсита.

Выводы. На монокристаллах $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$ показано, что старение под сжимающей нагрузкой в сочетании с изотермической и изобарической тренировкой приводит к эффективному способу получения двустороннего эффекта памяти формы. Показано, что изотермическая тренировка, за счёт высоких приложенных напряжений 140 МПа и большого количества циклов приводит к увеличению ДЭПФ на 0,5-1,0 % в состаренных без нагрузки и под нагрузкой монокристаллах I и II , и увеличению механического гистерезиса на 18 К в состаренных под нагрузкой монокристаллах по сравнению с изобарической тренировкой.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 16-19-10250.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Fukuda T., Deguchi A., Kakechita T. Two-way shape memory properties of a Ni-rich Ti-Ni alloy aged under tensile-stress // Saburi Materials transaction. – 1997. – V. 38. – N. 6 – P. 514-520
2. Медицинские материалы и имплантанты с памятью формы / Под редакцией В.Э. Гюнтера. – М: Изд-во МИЦ. – 1998. – Т. 1. – 224-280 с.
3. Timofeeva E.E., Panchenko E.Yu., Chumlyakov Yu.I., Vetoshkina N.G., Maier H.J. One-way and two-way shape memory effect in ferromagnetic NiFeGaCo single crystals // Materials Science & Engineering A. – 2015. – V. 640. – 465–470
4. Atli K C, Karaman I, Noebe R D, Bigelow G and Gaydosh D Work production using the two-way shape memory effect in NiTi and a Ni-rich NiTiHf high-temperature shape memory alloy // Smart Mater. Struct. – 2015. – V. 24. – 125023

КОРРЕКЦИЯ ВКЛАДА ИСТОЧНИКА Ti^{44}

А.Д. Ломыгин, К.Д. Уразова, Ю.С. Бордулев

Научный руководитель: Ю.С. Бордулев

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: lomyginanton141@gmail.com

CORRECTION SOURCE CONTRIBUTION Ti^{44}

A.D. Lomygin, K.D. Urazova, Y.S. Bordulev

Scientific Supervisor: Y.S. Bordulev

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

E-mail: lomyginanton141@gmail.com

Abstract. *Currently, positron annihilation methods are the most effective methods of studying the defect structure of the substance. The radioisotopes are usually used as sources of positrons inmethods of positron annihilation. In this research, the contribution of Ti44 source in positron lifetime spectra is studied. The experiment was performed by positron lifetime spectrometry. As a result of this experiment the dependence of Ti44 source contribution on atomic number of studied element was obtained.This dependence was described by the function, obtained by the least squares method. This function can be used for Ti44 source contribution evaluation for any material.*

Введение.Спектрометриявременижизнипозитроноввнастоящеевремяширокоиспользуетсядляанали задефектнойструктурыматериалов [1]. Традиционным источником позитронов, применяемым сегодня является изотопNa^{22}.Однако, данный источник не производится на территории Российской Федерации. В качестве альтернативного источника может быть использован изотопTi^{44}, характеристики которого не до конца изучены.Данный источник обладает рядом преимуществ. Не смотря на это, еговклад в спектры времени жизни позитроновнеопределен. Существует зависимость (1) вклада источника позитронов от атомного номера образца[2,3]:

$$S.C. = a * Z^b + c * \ln(Z) + d * Z + e, \quad (1)$$

где S.C. – вклад источника в спектр времени жизни позитронов (СВЖП), Z–атомный номер исследуемого материала.

Данная зависимость имеет ряд коэффициентов (*a, b, c, d, e*), которые необходимо определить. Найденные коэффициенты дадут возможность определять вклад источника Ti^{44}для разных элементов периодической таблицы Д.И.Менделеева, а свободный коэффициент (*e*) покажет постоянную долю позитронов, которые аннигилируют в самом источнике Ti^{44}. Таким образом, **целью** данной работы является коррекция источника позитронов Ti^{44} в СВЖП. Для достижения поставленной цели необходимо было выполнить следующие **задачи**:

1. Подготовить образцы для проведения опыта;
2. Снять спектры времени жизни позитронов с использованием источника Ti^{44};
3. Обработать спектры(с помощью специального программного обеспечения);

4. Аппроксимировать зависимость вклада источника Ti^{44}, т.е узнать неизвестные коэффициенты из формулы (1).

Материалы и методы.В эксперименте были использованы следующие металлы: алюминий(Al), железо(Fe), никель(Ni), медь(Cu), цинк(Zn), свинец(Pb), цирконий(Zr), олово (Sn). Данные материалы были отожжены ввакуумной печи, для обеспечения бездефектнойструктуры. Характеристики отжига описаны в таблице 1.

Таблица 1.

Характеристики отжига материалов

Исследуемый материал	Время отжига, час	Температура отжига, К
Алюминий	1	773
Железо	2	1173
Никель	2	1173
Медь	2	1123
Цинк	1	523
Свинец	1	523
Цирконий	2	1173
Олово	2	493

Метод СВЖП основан на измерении отрезка времени между двумя событиями: рождением и аннигиляцией позитрона. Полученные значения времени жизни позитронов собираются в спектр, со статистикой примерно 5-10 миллионов событий, где по оси абсцисс откладывается время жизни, по оси ординат – интенсивность. Далее происходит обработка спектров в программе LT10, с помощью мульти экспоненциальной модели. Результатом данной обработки является набор компонент (для каждого состояния позитрона), характеризуемых временем жизни и интенсивностью. Из данной обработки может быть получена доля позитронов, аннигилирующих непосредственно в источнике позитронов (вклад источника).Аппроксимация экспериментальной зависимости вклада источника от атомного номера образца с помощью функции (1) реализуется с помощью метода наименьших квадратов с применением программного продукта MatLab.

Результаты.Результаты,полученные с помощью программы LT 10представлены в Таблице 2.

Таблица 2

Результаты обработки в программеLT 10

Материалы	Время жизни, пс	Атомный номер	Вкладисточника	χ^2
Al	166.80±0,08	13	16,57	1,0228
Fe	109.90±0,09	26	19,44	1,00435
Ni	106.80±0,05	28	20,21	0,9982
Cu	117.40±0,03	29	20,65	1,00815
Zn	149.50±0,05	30	19,84	1,01895
Zr	160.50±0,01	40	22,1	1,01965

Pb	201.9±0,1	82	26,86	0,9965
Sn	197.9±0,2	50	22,1	1,0393

Из таблицы видно, что времена жизни позитронов исследуемых материалах соответствуют временам жизни позитронов в бездефектных материалах[4]. Видно, что значение χ^2для всех спектровблизко к 1. Следовательно, данные спектры обработаны корректно.Из таблицы видно, что существует зависимость между атомным номером элемента и вкладом источника. Данные о вкладах источников используются далее для аппроксимации зависимости, которая выполняется при помощи программы MatLab.

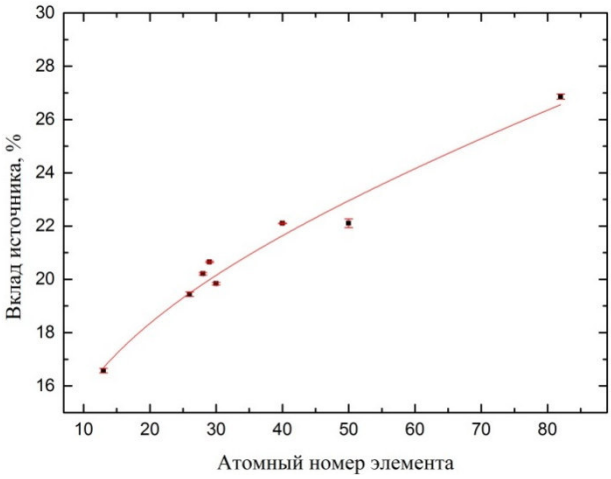


Рис. 2. Зависимость порядкового номера элемента от вклада источника

В ходе аппроксимации методом наименьших квадратов, были получены следующие коэффициенты: *a* = 2,76 , b =-15, c =2,7, d =0,07, e =8,8.

Заключение. В результате данной работы был изучен источник позитронов Ti^{44}.Полученна зависимость вклада источника от атомного номера образца. Данная зависимость была аппроксимирована методом наименьших квадратов.Были определены коэффициенты функциональной зависимости вклада источника от атомного номера материала. Данные коэффициенты могут быть использованы для расчета вклада источника Ti^{44}для любого материала. Также была определена постоянная доля позитронов, аннигилирующих в самом источнике, которая составила8,8%.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. ГрафутинВ.И., Графутин Е.П. Прокопьев. Применение позитронной аннигиляционной спектроскопии для изучения строения вещества//Приборы и методы исследований. – 2002. – Т. 172. – № 1.
2. Surbeck H., Lebensdauerder Positronenin Silberbromid .Helv. Phys. Acta 1977; 50: 705-721.
3. Djourelov N., Misheva M., Phys J. Source correction in positron annihilation lifetime spectroscopy.Condens.1996.
4. 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.

МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕНТГЕНОВСКОЙ ТОМОГРАФИИ НА ОСНОВЕ ПРЯМОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ РАДОНА

А.Д. Ломыгин, А.Х. Оздиев
Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. Ю.Ю. Крючков
Томский Политехнический Университет, Россия, Томск, пр.Ленина 30, 634050
lomyginanton141@gmail.com

X-RAY TOMOGRAPHY SIMULATION BASED ON DIRECT RADON TRANSFORM

A.D. Lomygin, A.H. Ozdiev
Scientific Supervisor: Prof., Dr. Yu.Yu. Kryuchkov
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050
lomyginanton141@gmail.com

Abstract. *Nowadays X-Ray tomography is one of the most actual direction of the development of non-destructive testing methods. Except of experimental setup to conduct the x-ray tomographic measurements it is necessary to have stable and flexible software. Existing software packages for the reconstruction of tomographic data mostly is not freeware distributed, and this makes conducting tomographic experiments not flexible, because of the restriction of the correction of the source code. This papers explains how to implement one of the important parts of tomographic research, namely the part of simulation of the experimental data, which allows to test reconstruction algorithms further.*

Введение. Наиболее простым способом моделирования процесса взаимодействия рентгеновского пучка с исследуемым объектом с математической точки зрения является прямое преобразование Радона. Пусть на плоскости, где введена прямоугольная система координат {x, y}, задана функция f(x, y). Проинтегрируем эту функцию по некоторой прямой, лежащей в данной плоскости. Очевидно, результат интегрирования, который обозначим R, зависит от того, по какой именно прямой проводится интегрирование. Всякая прямая может быть описана уравнением

$$x \cdot \cos(\varphi) + y \cdot \sin(\varphi) - s = 0, \quad (1)$$

где s – расстояние от начала координат до этой прямой, φ – угол, образованный с осью x перпендикуляром, опущенным из начала координат на эту прямую. Согласно формуле (1) произвольная прямая однозначно задается двумя параметрами s и φ. Поэтому и результат интегрирования функции f(x, y) по некоторой прямой будет зависеть от этих же параметров, т.е. $R = R(s, \varphi)$.

Это преобразование имеет специальное название – преобразование Радона, а функцию R(s, φ) часто называют образом функции f(x, y) в пространстве Радона [1].Таким образом, моделирование томографического эксперимента представляет из себя расчет интегральных сумм вдоль направления распространения рентгеновского излучения. В качестве тестового изображения был использован фантом Шепа-Логана, который является моделью человеческой головы, использованной учеными Л. Шепом и Б. Логаном в своих исследованиях.

Моделирование. Тестовый фантом моделирует одиночный слой исследуемого объекта, по сути это обычное изображение, которое представляет собой двумерный массив [2]. Суммирование каждого отдельного значения пикселя вдоль траектории пучка будет выполнять моделирование томографического сканирования. С одной стороны, можно предположить, что толщина каждого отдельного луча равна толщине пикселя, с другой стороны, если необходимо получить значение между двумя пикселями, оно может быть аппроксимировано из соседних пикселей. Существует два способа моделирования томографического эксперимента – моделирование параллельного и моделирование веерного пучков излучения.

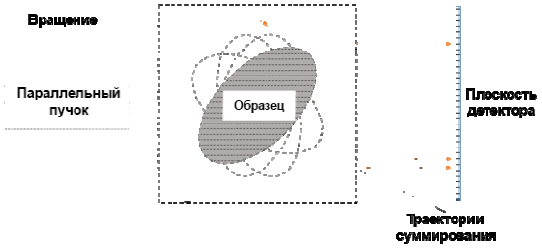


Рис. 1 – Параллельное распространение рентгеновского излучения

Параллельный пучок. В случае параллельного пучка(рисунок 1) моделирование выполняется путем суммирования значений пикселей в прямом направлении вдоль параллельных друг другу траекторий. В этом случае алгоритм представляет собой цикл, состоящий из двух этапов: суммирование и вращение [3]. Угловой диапазон и угловой шаг определяет количество циклов и количество строк или столбцов в синограмме. Каждый угловой поворот в результате дает строку синограммы. Конечная синограмма формируется из набора таких строк.

Веерный пучок. В случае веерной формы пучка следует считать, что траектории лучей не совпадают со строками массива, которые являются тестовым изображением. По-прежнему необходимо вычислять сумму значений из пикселей, которые лежат на одних и тех же прямых линиях, которые распространяются не параллельно друг другу, а в форме веера или конуса, если говорить о трехмерном случае, повторяя при этом форму реального рентгеновского пучка. В этом случае как раз необходима операция аппроксимации значения из двух соседних пикселей. Алгоритм моделирования томографического эксперимента для случая веерного пучка состоит из трех этапов: вычисление траекторий распространения пучка; суммирование значений, лежащих на вычисленных траекториях и поворот тестового изображения.

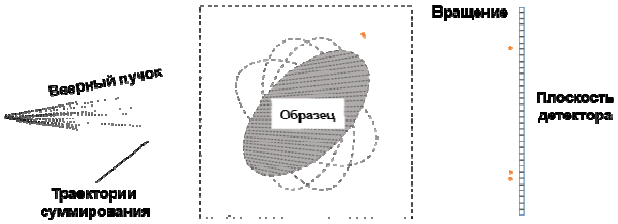


Рис. 2 – Веерное распространение рентгеновского излучения

Результаты моделирования. Для того, чтобы подтвердить, что алгоритм работает корректно, полученные синограммы были использованы для восстановления первоначального тестового изображения для обеих геометрий – параллельной и веерной. Программное обеспечение SkyScanNRecon используется для восстановления поперечного сечения изображения из проекционных данных, его работа основана на алгоритме Фельдкампа .На рисунке 3представлены результаты моделирования синограмм для параллельного пучка (а) и синограмм для геометрии веерного пучка (б). Для проверки достоверности смоделированных данных восстановленные изображения были вычтены из исходного тестового изображения.

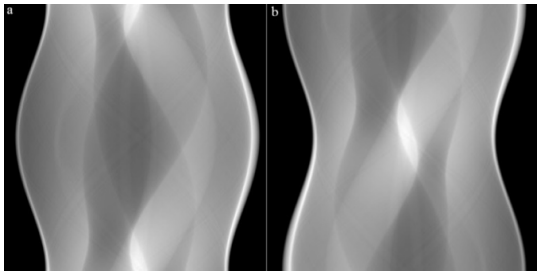


Рис. 3 – Синограмма для параллельной геометрии пучка (а), синограмма для веерного пучка (б)

На рисунке 4 показаны результаты реконструкции в сравнении с тестовым изображением. Нулевая разница между первоначального тестового изображения и изображения, восстанавливаемого из моделируемых данных указывает на то, что подход моделирования работает правильно.

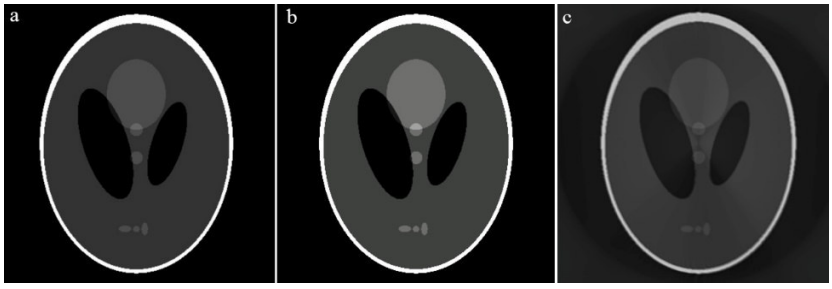


Рис. 4 – Фантомное изображение (а), изображение, восстановленное из параллельной геометрии пучка (б), изображение, восстановленное из геометрии веерного пучка (с)

Выводы. Предлагаемый подход моделирования дает возможность работать с алгоритмами рентгеновской реконструкции, тестировать новые подходы к реконструкции на смоделированных данных. Это простой и гибкий способ для проведения теоретических исследований.

Работа выполнена при финансовой поддержке Государственного задания «Наука» в рамках научного проекта № 11.6342.2017/БЧ

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1 Троицкий И.Н., Статистическая теория томографии. - М:. Радио и связь, 1989. - 82с.

2 Gonzalez R.C., Woods R.E., Digital Image Processing, third ed., Pearson, 2007

3 Herman G.T., Fundamentals of Computerized Tomography: Image Reconstruction from Projections, 2009. - p. 12

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОСТИМУЛИРОВАННОГО ВЫХОДА ВОДОРОДА ИЗ ТИТАНА

Лю Ланьцзэ, В.С. Сыпчеко, Л.И. Семкина,
Научный руководитель: профессор, д.ф-м.н. Ю.И. Тюрин
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050
E-mail: larrymath@163.com

THE STUDY OF THERMALLY STIMULATED RELEASE OF HYDROGEN FROM THE TITANIUM

,Liu Lanze, V.S. Sypchenko, L.I. Semkina
Scientific Supervisor: D.P-M.S, Prof., Dr. Yu.I. Tyurin
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050
E-mail: larrymath@163.com

Abstract. *Studing the thermally stimulated process of diffusion and release of hydrogen from the titanium Bt1-0 amongst high temperature. Confirming active energy release of Titanium sample of different thickness and different methods of saturation (Sieverts and electrolytic).*

Введение. Свойства водорода в титане являются важной проблемой для многих задач прикладного и фундаментального характера. В работе исследуются, свойства титана накапливать и хранить водорода, что существенно в задачах водородной энергетики. В то же время, водород, обладая высокой подвижностью в твердых телах, представляет самостоятельный интерес для изучения его поведения при высокой температуре в титане. Экспериментально показано, что процесс диффузии и выхода водорода из титана может быть ускорен за счет нескольких эффектов, при нагреве до высокой температуры. Диффузия атомов в присутствии возбужденной подсистемы легких атомов, может быть стимулирована радиацией, в условиях эффективного обмена колебательными квантами в водородной подсистеме. В отличие от электронной подсистемы, подсистема водород-металл способна запасать энергию на время, достаточное для осуществления ускоренного процесса диффузии.

Методика эксперимента

Изучение миграции, диффузии и выхода изотопов водорода из металлов в условиях линейного нагрева со скоростью 1 град/сек осуществлялось методом масс-спектрометрии in situ на высоковакуумной ($P_{ост}$< 10^{-5} Па) установке с безмаслянной откачкой.

Металлы водородом насыщались методом Сивертса при давлении 2 атм ,600^0C в течении 20 минут или в 0.1 н растворе H_2SO_4 при токах 0,2 А/см^2 в течение 6 часов. Программируемый нагрев осуществлялся внешним коаксиальным нагревателем. Температуру измеряли термопарой на лицевой и тыльной сторонах образцов.

На рис 1, 2 представлены скорости выхода дейтерия из титана в случае термического (ТСГВ) линейного нагрева со скоростью 1,0 К/с (кривые 1). Увеличение скорости нагрева способствует сдвигу максимума на кривых газовыделения в более высокотемпературную область. Величина энергии активации десорбционного выхода водорода для линейного нагрева образца может быть определена по формуле Редхеда [1]:

$$E_d = kT_{\max}(\ln\frac{\nu_1 T_{\max}}{\beta} - 3{,}64)$$

где $\beta = \frac{dT}{dt}$ - скорость нагрева, В таблице приведены результаты расчета выхода энергий активации десорбции водорода при линейном термическом нагреве со скоростью ~1 К/с. $\nu_1 \sim 10^{13}c^{-1}$ – частотный фактор десорбции водорода.

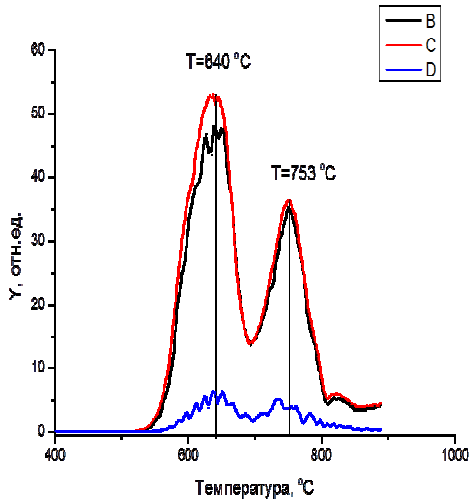


Рис1.ТСГВ,Ti,Вт1-0,P=2атм,t=20мин,T=600C, d=0.93mm,C=033масс%.

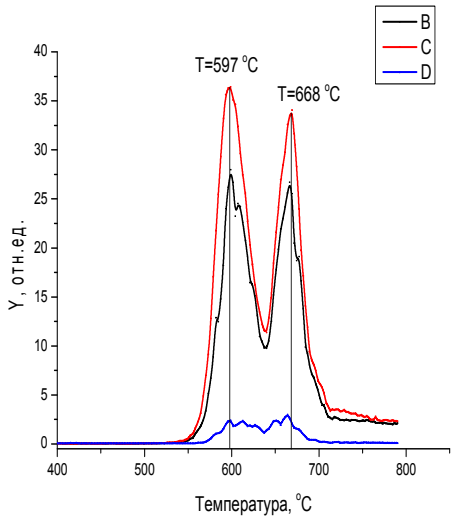


Рис2.ТСГВ,Ti,Вт1-0,P=2атм_t=20мин_T=600C, d= 0.2mm,C=0,42масс%.

Образец	β(ТСГВ), К/с	$T_{\max}$ (ТСГВ), С	E_d (ТСГВ), эВ	$T_{\max}$ (ТСГВ), С	E_d (ТСГВ), эВ
Ti(d=0.93mm)	1	640	1.8	753	2.1
Ti(d= 0.2mm)	1	597	1.7	668	1.9

Экспериментальные результаты

Полученные результаты показывают, что увеличение толщины образца сопровождается сдвигом максимума термогазовыделения в высокотемпературную область. По положению максимума термогазовыделения и точек перегиба на кривых термогазовыделения удается определить энергию активации и предэкспоненциальный множитель коэффициента диффузии для титана.

По положению максимума термогазовыделения $T_{\max}$ можно определить величину энергии активации диффузионного выхода водорода в режиме линейного нагрева

$$E_a = xkT_{\max}$$

Величина x определяется из уравнения:

$$x\exp x = \frac{E_a}{kT_{\max}}\exp(\frac{E_a}{kT_{\max}}) = \frac{\pi^2 D_0 T_{\max}}{d^2\beta} = \pi^2\left(\frac{l_D}{d}\right)^2\frac{\nu_{диф}T_{\max}}{\beta},$$

Выводы.

Полученные результаты показывают, что наиболее вероятной лимитирующей стадией является выход водорода из приповерхностного слоя титана с высоко активационными десорбционными процессами.

Материал	T, K	$D_0, 10^{-3} см^2/с$	E, кДж/моль	E_1, эВ	E_2, эВ
Ti (0,2мм)	500-1173	10±5,0	51,5〓3,22	0,70 (870K)	0,76 (941K)
Ti(0,93мм)	500-1373	10±5,0	36,6〓2,03	0,57 (913K)	0,65 (1026 K)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. 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 // Vacuum Volume131, September 2016, Pages 73–80.

ЭЛЕКТРОН-ПОЗИТРОННАЯ АННИГИЛЯЦИЯ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ СТРУКТУРЫ НАНОАЛМАЗОВ ПОСЛЕ ЦИКЛИЧЕСКОЙ СОРБЦИИ ВОДОРОДА

Л.В. Гулидова, Лю Чао

Научный руководитель: ассистент кафедры общей физики ФТИ Л.В. Гулидова

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: 987823496@qq.com

STUDY THE STRUCTURE OF NANODIAMONDS BY ELECTRON-POSITRON ANNIHILATION AFTER ADDING A CERTAIN AMOUNT OF CYCLIC HYDROGEN

L.V. Gulidova, Liu Chao

Scientific Supervisor: assistant of General Physics department L.V. Gulidova

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

E-mail: 987823496@qq.com

***Abstract**: Nanodiamond samples with various densities were studied by positron annihilation spectroscopy with the aim of finding out the hydrogen saturation effect on nanodiamonds. The positron lifetime measurements were carried out on packed nanodiamonds with various densities at room temperature and atmospheric pressure. The density of compacted samples does not affect positron lifetime.*

Keywords: nanodiamonds, positron annihilation spectroscopy, positron lifetime

Наиболее продвинутая область применения наноалмазов это полировальные составы, хром-алмазные износостойкие покрытия для нефтедобычи и добавки к машинным маслам. Интерес к наноалмазам велик и в Европе и в Азии. Но широкому внедрению препятствует ряд проблем:

1. отсутствие стандартизации наноалмазов;
2. низкая стабильность качества наноалмазов у различных производителей;
3. незрелость технологий;
4. отсутствие опыта работы с наноалмазами.

Однако уникальные свойства наноалмазов гарантируют им присутствие в арсенале инновационных технологий. А нерешенные проблемы дают возможность для более детального и полноценного изучения этих уникальных структур.

Целью данной работы является изучение структуры и дефектов наноалмазов (НА) с помощью электрон-позитронной аннигиляции (ЭПА).

Методы исследования: Спектроскопия времени жизни позитрона.

Для определения времени жизни позитронов в веществе используют метод запаздывающих совпадении. Суть метода заключается в измерении скорости счета запаздывающих совпадений между ядерным γ-квантом с энергией, который испускается почти одновременно с позитроном, и аннигиляционным γ -квантом с энергией 0.511 МэВ. Время жизни позитрона зависит от плотности электронов в месте его нахождения. Для измерения времени жизни позитронов в веществе обычно используются радиоизотопные источники. Ядерный γ -квант, соответствующий переходу с первого возбужденного

уровня на основной, возникает вслед за позитронным распадом за время, меньшее, чем 10^{-11}с, и служит реперной нулевой точкой на временной шкале.

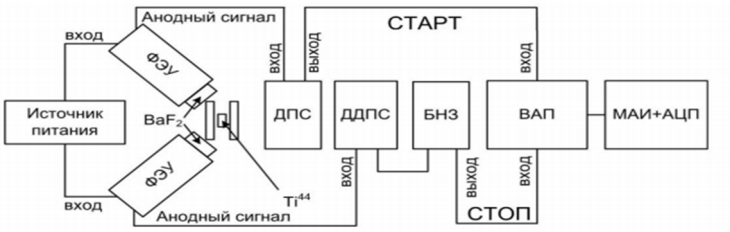


Рис.1 Схема аналогового спектрометра для измерения времени жизни позитронов в материале

После попадания в вещество, позитрон теряет кинетическую энергию в процессах упругого и неупругого рассеяния и аннигилирует с электронным окружением вещества с образованием двух аннигиляционных γ – квантов с энергией 0.511 МэВ [2].

Результаты и их обсуждение

Ниже представлен спектр времени жизни позитрона для образцов источника. Результаты обработки спектров представлены в таблице 1.

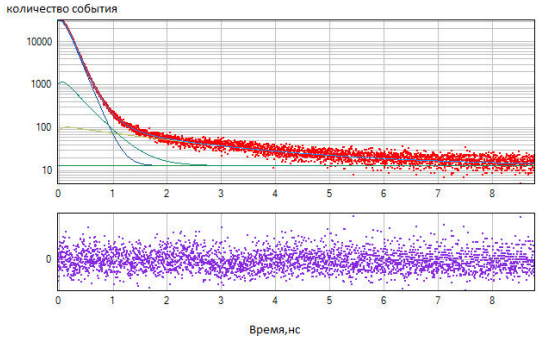


Рис.2 Спектр образца наноалмазов

Время жизни позитронов в образце после 10 циклов сорбции-десорбции водорода наиболее приближено к графиту. Поэтому, можно предположить, что увеличение циклов насыщения водородом приводит к графитизации наноалмазов. Ps ограничен сферической ямой с бесконечно высокими стенками, что дает прямую связь между временем жизни o-Ps и радиусом свободного объема. Радиус пор рассчитывался по модели Тао—Элдруппа

$$\tau_{o-ps}^{-1}[ns] = 2(ns)^{-1}[1 - \frac{R}{R_0} + \frac{1}{2\pi}\sin(\frac{2\pi R}{R_0})],$$

где R—средний радиус отверстий $R_0 = R + \Delta R$ и $\Delta R = 0.166$ нм.

В эксперименте для каждого образца до и после насыщения водородом в соответствии с моделью Тао-Элдруппа был рассчитан средний радиус пор. Радиусы пор составили 0.1178 нм, 0.1182 нм, 0.1186 нм, 0.1189 нм, 0.1192 нм, 0.1196 нм, 0.1272 нм. Эксперимент показывает что, при увеличении циклов сорбции-десорбции водорода до 10, размер пор увеличивается (рис. 3).

Таблица 1.

Время жизни позитрона и интенсивность для образцов наноалмазов

Образец наноалмазов	Время жизни позитрона, нс			Интенсивность, %		
	τ_1 (нс)	τ_2 (нс)	τ_3 (нс)	I_1 (%)	I_2 (%)	I_3 (%)
1	0.268±0.007	0.564±0.006	3.414±0.259	69.981	26.521	3.498
2	0.239±0.009	0.496±0.009	3.136±0.170	71.703	25.928	2.956
3	0.250±0.009	0.496±0.028	2.981±0.137	71.116	24.882	3.604
2 +H	0.254±0.006	0.534±0.006	3.873±0.305	73.080	24.196	2.725
3 +H	0.254±0.006	0.534±0.006	3.873±0.305	73.628	23.732	2.641
2 +2H	0.262±0.001	0.521±0.002	2.973±0.132	71.270	25.300	3.431
1+10H	0.151±0.084	0.424±0.136	2.351±0.440	34.654	60.279	5.067
Графит	0.120±0.050	0.422±0.051	2.829±0.179	25.226	73.260	1.313

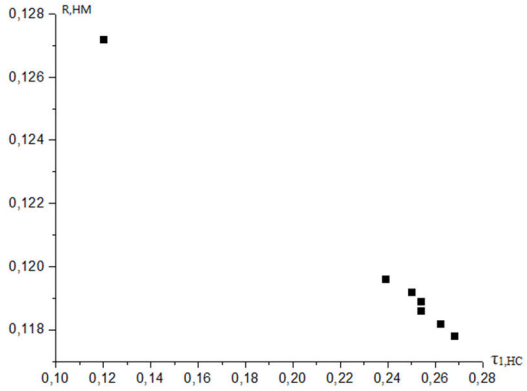


Рис.3. График зависимости размера пор от времени жизни позитронов

Выводы. Воздействие на материал водородом, количество и размеры дефектов изменяют время жизни позитронов. Изучая параметры позитронной аннигиляционной спектроскопии, можно будет контролировать качество углеродных структур.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1 Верещагин А.Л. Наноалмазы — первичное состояние углерода во Вселенной. Учебное пособие - Барнаул, 2001. – 178 с.

2 Лаптев Р. С. Разработка метода аннигиляции позитронов для контроля дефектной структуры в системах металл–водород. Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. Томск, 2014. – 31 с.

ФОРМИРОВАНИЕ БИОИНЕРТНЫХ УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТЫХ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ ТИТАНА, НИОБИЯ И ЦИРКОНИЯ

А. Майрамбекова[1], Н.К. Ахметова[2]

Научный консультант: к.т.н., н.с. А.Ю. Ерошенко

[1]Национальный исследовательский Томский государственный университет,

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

[2]Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: aikol0708@mail.ru

PRODUCTION OF BIOINERT ULTRA-FINE GRAINED ALLOYS BASED ON TITANIUM, NIOBIUM AND ZIRCONIUM

A. Mairambekova[1], N.K. Ahmetova[2]

Scientific consultant: PhD, senior researcher. A.Yu. Eroshenko

[1]Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050

[2]Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: aikol0708@mail.ru

Abstract. *The results of investigation of microstructure, phase composition, mechanical properties (microhardness) of bioinert binary alloys – low-modulus Ti-40 wt.%Nb (Ti40Nb) and 1 wt.% niobium-alloyed zirconium (Zr1Nb) in ultrafine-grained state are represented. The ultrafine-grained structure was produced by two-stage severe plastic deformation (SPD) method, which included the multiple abc-pressing and multi-pass rolling in grooved rolls and further pre-recrystallizing low-temperature annealing. The ultrafine-grained structure with average structural elements size of 0.32 μm for Ti40Nb and 0,25 μm for Zr1Nb are formed in alloys as a result of SPD. Ultrafine-grained structure provides high level of mechanical properties (microhardness) while elastic modulus initial level retains.*

Введение. В настоящее время успешное применение в медицине находят вентильные биоинертные металлы – титан, цирконий, ниобий и их сплавы. В последние годы появилась возможность использовать в медицине сплавы на основе циркония, которые обладают высокой коррозионной стойкостью, прочностью и биоинертностью. Модуль упругости у титана и титановых сплавов медицинского назначения находится в пределах 100-120 ГПа, что значительно выше модуля упругости костной ткани (15-55 ГПа) [1]. Низкий модуль упругости материала имплантата, сопоставимый с модулем упругости для костной ткани, позволяет осуществлять равномерное распределение деформаций и механических напряжений в системы «кость-имплантат». В качестве материала имплантата представляет наибольший интерес применение биоинертных титановых β-сплавов, например, сплавов систем Ti-Nb или Ti-Nb-Zr с низким модулем упругости. Легирование титана ниобием до 40-45 мас. % позволяет уменьшить модуль упругости до 55 ГПа, что сопоставимо с модулем упругости кости, но при этом происходит снижение и прочностных характеристик [2]. Формирование в биоинертных сплавах наноструктурного (НС) и ультрамелкозернистого (УМЗ) состояния методами интенсивной пластической

деформации (ИПД) позволяет решить данную задачу и получать заготовки и изделия со значительно более высокими механическими свойствами.

Материалы и методы исследования. В качестве материала исследования были выбраны сплавы – Ti-40 мас. % Nb (Ti40Nb) и Zr-1 мас. % Nb (Zr1Nb). Перед деформационной обработкой заготовки сплава Ti40Nb в литом состоянии отжигали при температуре 1100 С в течение 1 часа в аргоне с последующей закалкой в воду, а образцы сплава циркония предварительно отжигали при температуре 580°С в течение 3 часов в вакууме [3]. После закалки микроструктура сплава Ti40Nb состояла из матричных β-зерен с размерами 120-650 мкм и α″-мартенсита. Распределение микротвердости по объему заготовки сплава Ti40Nb неоднородное. Для зерен β-фазы значения микротвердости находятся в пределах 1300-1900 МПа, а для мартенситной α"-фазы – 2800-3500 МПа. Структура сплава Zr1Nb в отожженном состоянии представлена основной фазой α-Zr с размерами 2-3 мкм и частицами второй фазы β-Nb. Для образцов Zr1Nb распределение микротвердости однородное и среднее значение микротвердости составило 1500 МПа [4].

Для формирования УМЗ структуры в исследуемых сплавах применяли комбинированный двухэтапный метод ИПД, состоящий из многократного abc-прессования и многоходовой прокатки с последующим рекристаллизационным отжигом [3]. В результате прокатки получали заготовки в форме прутков с размерами поперечного сечения (6×6×300) мм. Для снятия внутренних напряжений и повышения пластичности готовые прутки Ti40Nb отжигали при температуре 400 °С, а прутки Zr1Nb – при 350 °С. Отжиги проводили в течение одного часа.

Результаты эксперимента. В результате ИПД по всему объему заготовки сплава Ti40Nb было сформировано УМЗ состояние со средним размером элементов структуры (зерна, субзерна и фрагменты) 0,32 мкм (рис. 1а,б).

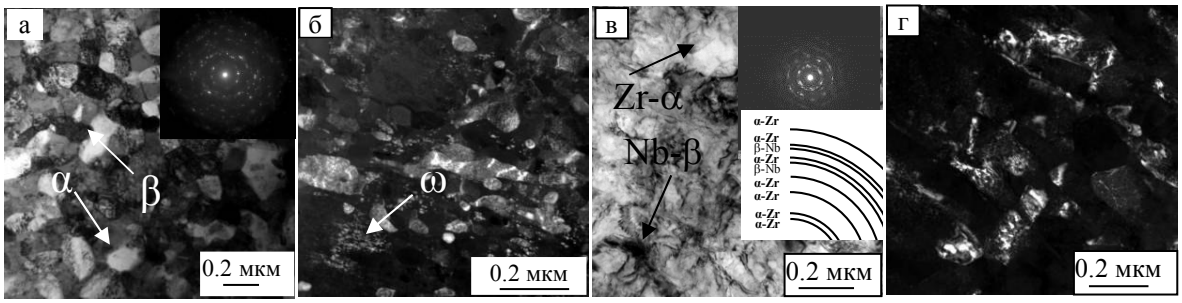


Рис. 1. Светлопольные (а,в) с соответствующими микродифракциями и темнопольные (б,г) изображения сплавов Ti40Nb (а,б) и Zr1Nb (в,г) в УМЗ состоянии

На светлопольном изображении (рис. 1а) хорошо видны субзерна и фрагменты, имеющие форму, близкую к равноосной. Рефлексы на микродифракции расположены по окружностям, что указывает на значительное измельчение исходной структуры и свидетельствует о присутствии высокоугловых границ зерен. При идентификации микродифракции были выявлены группы рефлексов от трех фаз: рефлексы от твердого раствора титана и ниобия (β-фаза) и рефлексы от α-фазы и ω-фазы.

В сплаве Zr1Nb, подвергнутого abc-прессованию и прокатке, формируется УМЗ состояние со средним размером структурных элементов 0,25 мкм. На светлопольном изображении (рис.1г) в большом количестве присутствуют контура экстинкции, которые локализованы, в основном, по границам субзерен и фрагментов. На микродифракции наблюдается большое количество точечных рефлексов,

расположенных по окружностям с типичным азимутальным размытием, указывающее на присутствие как большеугловых, так и малоугловых разориентаций. Расшифровка микродифракций показала наличие рефлексов высокой интенсивности от основной фазы α-Zr (ГПУ-решетка) и низкой интенсивности от фазы β-Nb (ОЦК-решетка). Среднее значение микротвердости после ИПД для сплава Ti40Nb составило 3300 МПа, а для Zr1Nb – 2600 МПа. Дополнительно для идентификации фаз применяли метод РСА (рис.2а,б).

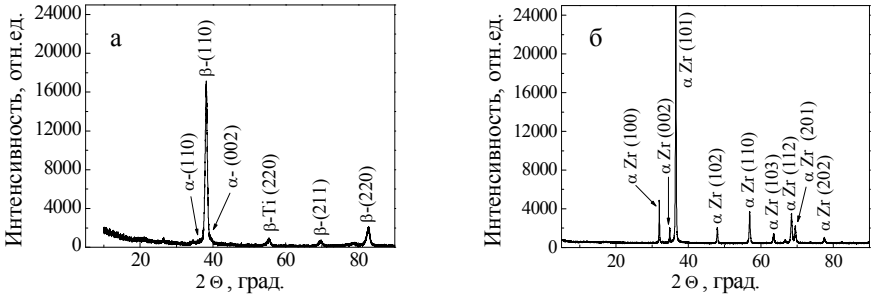


Рис.2. Рентгенограммы УМЗ сплавов: а – Ti40Nb, б – Zr1Nb, сформированные двухэтапной ИПД

На рентгенограмме для УМЗ Ti40Nb присутствуют рефлексы только от основной матричной β-фазы и α-фазы. Рефлексы от ω-фазы на дифрактограммах не обнаружены, вероятно, вследствие нанокристаллического размера данной фазы и ее небольшой объемной доли. Согласно данным (РСА) в УМЗ сплаве Zr1Nb присутствует основная фаза α-циркония. Рефлексы от второй фазы, частиц β-ниобия, которые были выявлены в результате ПЭМ-анализа, методом РСА не удалось идентифицировать. Значения модуля упругости для УМЗ Ti40Nb находятся в пределах 70-75 ГПа, а для УМЗ Zr1Nb –50-60 ГПа, которые определяли при измерении нанотвердости.

Заключение. Комбинированный метод ИПД, включающий многократное abc-прессование и многоходовую прокатку, приводит к формированию в бинарных сплавах Ti-40 мас. %Nb и Zr-1 мас. %Nb УМЗ структуры со средним размером структурных элементов, равных соответственно 0,32 мкм и 0,25 мкм. Многофазная УМЗ структура в исследуемых сплавах по сравнению с исходным крупнозернистым состоянием обеспечивает значительное повышение механических свойств (микротвердости) при сохранении низкого значения модуля упругости.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Abdel-Hady Gepreel M., Niinomi M. Biocompatibility of Ti-alloys for long-term implantation // Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials. V. 20 (2013). P.407-415.
2. Valiev R.Z., Zhilyaev A.P., Langdon T.G. Bulk Nanostructured Materials: Fundamentals and Applications // Publ. Wiley and TMS, Hoboken, USA, 2014. P.456.
3. Sharkeev Y.P., Eroshenko A.Y., Glukhov I.A. , *et al*. Microstructure and mechanical properties of Ti–40 mass % Nb alloy after megaplastic deformation effect. AIP Conf. Proc. New York: AIP Publishing LLC. 2015; 1683: 020206.
4. Шаркеев Ю.П., Ерошенко А.Ю., Данилов В.И., Глухов И.А., Толмачев А.И. Получение биоинертных сплавов в ультрамелкозернистом состоянии // Известия высших учебных заведений. Черная металлургия. 2015. Т. 58. № 2. С. 112-116.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, проект Президиума РАН программа 35.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТОЛКНОВЕНИЯ ЧАСТИЦЫ, ДВИЖУЩЕЙСЯ В ПОТОКЕ ГАЗА С ТВЕРДОЙ СТЕНКОЙ

Н.А. Мамадраимова, А.В. Андриасян, О.В. Матвиенко
Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. О.В. Матвиенко
Томский государственный архитектурно-строительный университет
Россия, г. Томск, пл. Соляная, 2, 634003
E-mail: mamadraimova96@mail.ru

INVESTIGATION COLLISION OF THE PARTICLES, MOVING IN THE STREAM OF GAS WITH THE FIRM WALL.

N.A. Mamadraimova, A.V. Andriasyan, O.V. Matvienko
Scientific Supervisor: Prof., Dr. O.V. Matvienko
Tomsk State University of Architecture and Building, Department of theoretical mechanics,
Solyanaya sq, 2,Tomsk, 634003, Russia
E-mail: matvolegv@mail.ru

Abstract. *The processes of extracting particulate matter include air, generally, the deposition of particles on dry or wetted surfaces and removing deposits from deposition surfaces. In the dust collector and the separation devices following methods of separating suspended solids from the weighing medium used: sedimentation in the gravitational field, sedimentation under the influence of inertial forces, as well as the deposition in a centrifugal field. Shock interaction of particles with the wall is a subject of research for a long time. Much of the research has been devoted to "dry" particles collision with the wall, that is a collision in a vacuum or an environment with little resistance. An important parameter characterizing the process of collision is elastic recovery ratio, defined as the ratio of the speed after impact to the velocity before impact.*

The calculation results show that the transfer of particles substantially in the horizontal direction depends on the particle diameter. Indeed, with an increase in particle size increases their inertia and the flow can not carry them over long distances. Furthermore, increase in size leads to an increase of deposition rate on the surface. Thus, smaller particles are transported over long distances than larger.

This trend is observed for the particle size of less than 100mikron (seen in the movement of air). Next, mode of interaction with the wall varies greatly. Beat ceases to be completely inelastic. Particles incident on the wall is obtained momentum directed away from the wall and carried into the stream. Then, under the influence of gravitational forces they rise speed is slowed down, and the particles begin to move back towards the wall.

The number of collisions increases with particle size. Thus, in the hammer mode of interaction the length to which the particles are transported, with their diameter increases.

Введение. В пылеочистительной технике большое распространение получили циклоны различных конструкций, однако принцип их работы одинаков и основан на использовании центробежной силы **[1–6].** При центробежном разделении дисперсной смеси придается вращательное движение внутри циклонного аппарата, при этом твердые частицы отбрасываются центробежной силой на периферию

аппарата к его стенке. При этом ударное взаимодействие частицы со стенкой во многом определяет ее дальнейшее движение и влияет на качество сепарации.

Метод исследования. Для моделирования движения одиночной частицы воспользуемся следующими предположениями:

- движение частицы происходит в сдвиговом потоке с линейным законом изменения скорости

$$U_X = \gamma z$$

- частицы дисперсной фазы предполагаются, сферическими, твердыми и недеформируемыми;

Уравнение движения центра масс частицы можно записать в виде:

$$\rho V(1+C_{vm})=\overrightarrow{F_D}+\overrightarrow{F_F}+\overrightarrow{F_S}+\overrightarrow{F_M}+\overrightarrow{F_B}+(1+C_{vm})\rho_в V\frac{D\overrightarrow{v_в}}{Dt}+(\rho-\rho_в)\overrightarrow{F_G}$$

$$\frac{\overrightarrow{d\omega_p}}{dt}=\frac{60\mu_в}{d^2{}_p}(\text{rot}\,\overrightarrow{v_в}-\overrightarrow{\omega_v})$$

$$\begin{cases}\dfrac{dx_p}{dt}=U_x,\\ \dfrac{dy_p}{dt}=U_y,\\ \dfrac{dz_p}{dt}=U_z,\end{cases}$$

Начальные условия имеют вид:

$$t=0: x=0, z=h,\ U_x=0,\ U_z=0,$$

Рассмотрим особенности соударения частицы со стенкой. В теории удара принято выделять две фазы ударного взаимодействия. В течении первой фазы удара (фазы сжатия) происходит деформация и торможение частицы. Во время этой фазы кинетическая энергия частицы переходит в потенциальную энергию сил упругости и частично расходуется на нагревание тела. Во время второй фазы удара (фазы восстановления) деформации частицы исчезают, частица восстанавливает свою форму. Потенциальная энергия переходит в кинетическую, и частица отскакивает от поверхности.

Изменение трансляционной и вращательной скорости движения частицы вследствие удара может быть определено методами теоретической механики с использованием основных теорем динамики материальной точки. При этом надо иметь в виду, возможно три сценария удара частицы о поверхность:

1. скольжение частицы прекращается в течение фазы сжатия;
2. скольжение частицы прекращается в течение фазы восстановления;
3. частица скользит по поверхности стенки в течение всего процесса удара.

Тип удара определяется величиной коэффициента статического трения, коэффициента восстановления, а также скоростью частицы в момент соударения.

Первый тип удара имеет место при выполнении следующих условий

$$\sqrt{\left(v_{ex}+\frac{1}{2}d_p\omega_{ey}\right)^2+\left(v_{ey}+\frac{1}{2}d_p\omega_{ex}\right)^2}<\frac{7}{2}f(1+e)v_{ez}$$

В этом случае, компоненты скорости движения центра масс частицы могут быть определены как:

$$v_{rx}=\frac{5}{7}\left(v_{ex}+\frac{1}{2}d_p\omega_{ey}\right)\qquad v_{ry}=\frac{5}{7}\left(v_{ey}+\frac{1}{2}d_p\omega_{ex}\right)$$

$$v_{rz}=-ev_{ez}$$

Компоненты вектора угловой скорости вращения частицы после удара найдутся как:

$$\omega_{rx} = 2\frac{v_{ry}}{d_p},\ \omega_{ry} = 2\frac{v_{rx}}{d_p},\ \omega_{rz} = \omega_{ez}. \quad (5)$$

Если условие (5) не выполняется, реализуется второй или третий тип удара. При этом скорости частицы после соударения найдутся как:

$$v_{rx} = v_{ex} + \varepsilon_x f(1+e)v_{ez}, \quad v_{ry} = v_{ey} + \varepsilon_z f(1+e)v_{ez},$$

$$v_{rz} = -ev_{ez}$$

$$\omega_{rx} = \omega_{ex} - 5\varepsilon_y f(1+e)\frac{v_{ez}}{d_p},\ \omega_{ry} = \omega_{ey} - 5\varepsilon_x f(1+e)\frac{v_{ez}}{d_p}$$

$$\omega_{ez} = \omega_{ez}$$

Направляющие косинусы ε_x и ε_y определяются следующим образом:

$$\varepsilon_x = \frac{\left(v_{ex} + \frac{1}{2}d_p\omega_{ey}\right)}{\sqrt{\left(v_{ex} + \frac{1}{2}d_p\omega_{ey}\right)^2 + \left(v_{ey} + \frac{1}{2}d_p\omega_{ex}\right)^2}}$$

$$\varepsilon_y = \frac{\left(v_{ey} - \frac{1}{2}d_p\omega_{ex}\right)}{\sqrt{\left(v_{ex} + \frac{1}{2}d_p\omega_{ey}\right)^2 + \left(v_{ey} - \frac{1}{2}d_p\omega_{ex}\right)^2}}$$

Коэффициент восстановления рассчитывается согласно зависимости

$\frac{e}{e_{max}} = f(Stk) = (1 - \exp(-0{,}043 \cdot Stk))^{3.29}$, где e_{max} - коэффициент восстановления в вакууме,

$Stk = \rho_{pV_n} d_{p/\mu}$ $_{Stk}$ - число Стокса.

Результат. Перенос частиц в горизонтальном направлении существенно зависит от диаметра частиц. Действительно, с увеличением размеров частиц увеличивается их инерционность, и поток не может переносить их на большие расстояния. Кроме того, увеличение размеров, приводит к увеличению скорости их осаждения на поверхность. Таким образом, более мелкие частицы переносятся на большие расстояния, чем более крупные.

Отметим, что число соударений увеличивается с ростом размеров частиц. Таким образом, в режиме ударного взаимодействия длина участка, на который переносятся частицы, возрастает с их диаметром.

1. СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

2. Дик И.Г., Матвиенко О.В., Неессе Т. Моделирование гидродинамики и сепарации в гидроциклоне // Теоретические основы химической технологии, 2000, Том 34, № 5, с. 478 – 488.
3. Матвиенко О.В. Анализ моделей турбулентности и исследование структуры течения в гидроциклоне // Инженерно-Физический журнал, 2004. Т. 77, № 2, с. 58-64.
4. Матвиенко О.В., Дик И.Г. Численное исследование сепарационных характеристик гидроциклона при различных режимах загрузки твердой фазы //Теоретические основы химической технологии, 2006, Т. 40, № 2, с. 216 –221.
5. Матвиенко О.В., Агафонцева М.В. Численное исследование процесса дегазации в гидроциклонах. //Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2012. № 4(20), С. 107-118.
6. Матвиенко О.В., Евтюшкин Е.В. Теоретическое исследование процесса очистки загрязненной нефтью почвы в гидроциклонных аппаратах //Инженерно-Физический журнал, 2007. Т. 80, № 3, с. 72-80.

ОЦЕНКА ВОЗМОЖНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ЧЕРЕНКОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ДЛЯ ОХЛАЖДЕНИЯ ПРОТОННОГО ПУЧКА ПО ЕГО ЭНЕРГЕТИЧЕСКИМ ПОТЕРЯМ

Ю.С. Маркова

Научный руководитель: профессор, д.ф-м.н. А.П. Потылицын, к.ф.-м.н. А.С. Коньков

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: juliatalaeva@gmail.com

THE ESTIMATION OF CHERENKOV RADIATION APPLICATION FOR PROTON BEAM COOLING ACCORDING TO ITS ENERGY LOSSES

J.S. Markova

Scientific Supervisor: Prof., Dr. A.P. Potylitsyn, Cand. Sc. A.S. Konkov

Tomsk Polytechnic University, Lenin Avenue 30, Tomsk, 634050, Russian Federation

E-mail: juliatalaeva@gmail.com

Аннотация. *Одной из основных задач современной физики ускорителей является увеличение энергии ускоренных заряженных частиц, изучение столкновения которых позволит ученым выйти за пределы Стандартной модели. Однако, с повышением энергии столкновения пучков, возрастают требования как к оборудованию, так и к характеристикам самого пучка. Одной из проблем при работе с протонными пучками является увеличение фазового объема пучка, так называемое «нагревание» протонов вследствие большого разброса кинетической энергии пучка. В данной статье рассматривается возможность использования излучения Вавилова-Черенкова для охлаждения высокоэнергетичных протонных пучков.*

Introduction. The Large Hadron Collider (LHC) is a two-ring-superconducting-hadron accelerator and collider built with the aim to reveal the physics beyond the Standard Model with center of mass collision energies of up to 14 TeV [1]. As much as proton colliders, LHC has the problem related to proton beams “heating”. In other words, the beam has the wide energy spread due to its transverse motion. To meet this challenge, the method of electron cooling was developed by G.I. Budker [2]. Nowadays, as the problem of “hot protons” arises with the beam energy growth; to satisfy such conditions new methods of protons cooling are investigated.

In the article the possibility of the use of dielectric targets, installed in the acceleration gap, for proton cooling is considered. The idea is based on the concept of polarization radiation arising as a result of dynamic polarization of media atomic shell by relativistic charged particle moving uniformly. There are different types of polarization radiation that differ by the character of optical inhomogeneities and the media where charged particle moves. When the charge moves with constant speed in media (or vacuum) along the boundary of dielectric target, the charge can lose its energy for Cherenkov radiation.

Approach. Let us consider the problem of radiation arising when a proton moves rectilinearly and uniformly in vacuum at the distance d from the dielectric target with permittivity $\varepsilon(\lambda)$ (Fig.1). According to the conditions of the LHC experiment, diamond is chosen as a target material.

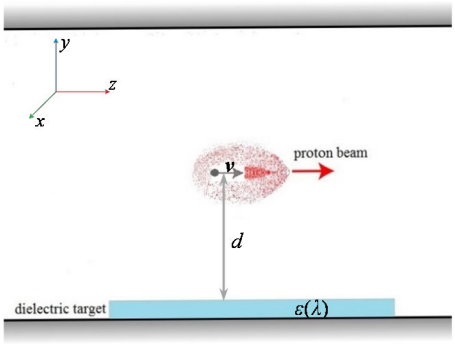


Fig. 1. Accelerated proton beam moving near the dielectric target with permittivity ε(λ)

There are several approaches for theoretical calculation of Cherenkov radiation characteristics. The one of them is the so-called method of images [3]. The method is based on the possibility to represent the field of charged particle as the ensemble of dipoles fields, arranged along the trajectory, and their imagines. Thus, by the Reciprocity theorem we can obtain the field of arbitrarily moving charged particle.

Assume that the target has infinite geometry along x and z axes as well as in negative direction along y-axis. When Cherenkov condition is satisfied only in the media of the target ($\varepsilon\beta^2>1$), all energy is radiated into the target. Intensity distribution along the generating lines of the Cherenkov cone is given by following equation [3]:

$$\frac{dW}{dz} = \frac{8\pi\alpha\hbar c}{\beta^2}\int_{\lambda_{min}}^{\lambda_{max}}\frac{d\lambda}{\lambda^3}\int_0^{\pi} d\varphi\,\frac{[(\varepsilon\beta^2-1)(\varepsilon_0+\varepsilon)\cos^2\varphi+\varepsilon(1-\varepsilon_0\beta^2)](\varepsilon\beta^2-1)\sin^2\varphi}{(\varepsilon-\varepsilon_0)[(\varepsilon_0+\varepsilon)\sin^2\varphi+\varepsilon\beta^2(\varepsilon\cos^2\varphi-\varepsilon_0\sin^2\varphi)]}\times$$

$$\times\, exp\left\{-d\frac{4\pi}{\beta\lambda}[(\varepsilon-\varepsilon_0)\beta^2-(\varepsilon\beta^2-1)\sin^2\varphi]^{1/2}\right\}, \qquad (1)$$

where φ is the azimuth angle, β is the particle velocity at the speed of light units, $\varepsilon_0 = 1$ is the permittivity of vacuum, ε is the permittivity of the target as a function of wavelength λ, α = 1/137 is the fine structure constant, $\hbar c$ = 0.2 (eV/μm) is the conversion constant.

Results and Discussions. The dependence of permittivity on the wavelength for diamond, obtained from Sellmeier's equation [4], is presented in Figure 2.

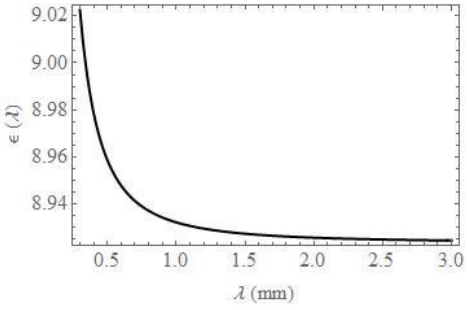


Fig. 2. The dependence of permittivity on the wavelength

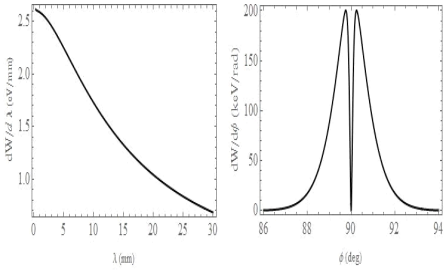


Fig. 3. The spectra and angular distribution of Cherenkov radiation

The calculations are made for the wavelength region within 0,3…3 mm (submillimeter waves). Such range is chosen because of the absorption properties of the target material are negligible in the concerned region. In this connection, the thermal degradation of the target will be decreased. As can be seen from Figure 2, the frequency dispersion (wavelength variation of the refractive index) is quite small (about 1%) and it decreases with the wavelength growth. The spectra and angular distribution of Cherenkov radiation are presented in Figure 3. Note that the results are obtained from the equation (1) after integrating over the azimuth angle for the beam with the concentration of 10^{11} and d = 1 cm upon condition that the beam covers the distance of 10 cm over the target. From the spectra we see that the proton beam will lose its energy for Cherenkov radiation more effectively in the submillimeter wavelength region.

The dependence of energy losses on the impact parameter d that obtained from the equation (1) after full integration is shown in Figure 3. From the obtained dependence we can conclude that the efficiency of the proton beam cooling has exponential dependence on impact parameter. The impact parameter will be defined according to the conditions of nonintersection with the target surface as well as effective damping radius of the particle Coulomb field, i.e. $d \leq \gamma\beta\lambda/(4\pi)$ (where $\gamma = \sqrt{1-\beta^2}$ is the particle's Lorenz-factor).

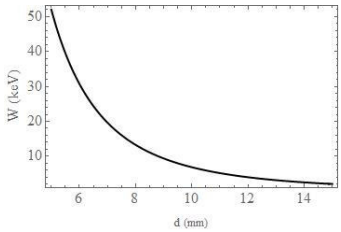


Fig. 4. The dependence of energy losses on the impact parameter d

Conclusion. According to the calculation, energy losses of the proton beam are 6,9 keV for required impact parameter value of 1 cm and the target length of 10 cm. As proton beam will moves within 26,7 km accelerated ring with the energy of 12 TeV, it will pass over the target $6{,}5 \cdot 10^6$ times. It gives us 44,85 GeV of energy losses for the ring per second. The CERN requirement is 273 MeV energy losses per second. According this estimation, our method complies with the requirement and it can be applied for CERN experiments in proton beam cooling. Therefore, the relevance of further development of the theoretical method for the energy losses estimation has been shown. The aim of our future work is to develop the theoretical model for energy losses estimation allowing for finite size of the target, using the method of polarization currents [5].

REFERENCES

1. The Large Hadron Collider: https://home.cern/topics/large-hadron-collider
2. Budker G. I., Skrinsky A. N. (1978) Usp. Fiz. Nauk, no. 124, p. 561.
3. Pafomov, V. E. (1957) Radiation of a Point Charge Moving Along the Boundary between Two Media. Journal of Experimental and Theoretical Physics, no. 32, p. 504.
4. Palik, E. D. Handbook of optical Constants of Solids. San Diego, Academic Press, 1998, 18p.
5. Karlovets, D. V., Potylitsyn A. P. (2009) Diffraction radiation from a finite-conductivity screen. Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters (JETP Letters), no. 5, pp. 368 – 373.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ЭВОЛЮЦИИ НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ В МАТЕРИАЛЕ С ПОКРЫТИЕМ

С.А. Мартынов.

Научный руководитель: в. н. с. д.ф.-м.н. Р.Р. Балохонов

Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук (ИФПМ СО РАН),

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

E-mail: martynov@ispms.tsc.ru

NUMERICAL MODELING OF OF EVOLUTION STRESS-STRAIN STATE IN COATED MATERIALS.

S.A. Martynov.

Scientific Supervisor: l. r. s, Dr R.R Balokhonov

Institute of Strength Physics and Materials Science of the SB RAS,

Russia, Tomsk, 2/4, pr. Akademicheskii, 634021,

E-mail: martynov@ispms.tsc.ru

Abstract. *The interfacial mechanisms of the stress concentration in materials with modified surface layers are investigated. A dynamic boundary-value problem in a plane-strain formulation is solved numerically by the finite-difference method. The geometry of a curvilinear interface corresponds to the configuration found experimentally and is explicitly accounted for in the calculations. Both the experimentally observed microstructure of a sample with an serrated coating-substrate interface and a model microstructure with an ideal sinusoidal shape of this boundary were considered. The constitutive model assumes that the modified surface layers are elastic, while the elasticity of the base material is followed by plastic flow which provides isotropic strain hardening. Serrated and wavy base material-surface layer interfaces observed experimentally are assigned explicitly in calculations. Two stages in the evolution of the stress concentration are found to occur due to irregular interfacial geometry. The stress concentration in near-interfacial regions turns out to depend on the parameters of sinusoidal wavy interface and coating thickness.*

Введение. Управляя механическими свойствами поверхностных слоёв, можно добиться существенного повышения эксплуатационных характеристик материалов и конструкций. Большинство современных материалов – это функционально–градиентные материалы или материалы с покрытием. Технологии поверхностного упрочнения широко применяются в различных отраслях промышленности, включая нефтеэнергетический комплекс, авиа– и автомобилестроение, сельское хозяйство и т.д., для повышения срока службы, а также восстановления изношенных деталей машин и механизмов [1]. Целью настоящей работы является - методами численного моделирования выявить особенности и закономерности деформирования композиции «пластичная подложка–хрупкое прочное покрытие», исследовать влияние структуры и геометрических характеристик покрытия на характер локализованного пластического течения в стальной подложке и разрушения боридного покрытия при растяжении.

Постановка задачи и результаты моделирования. Стали с керамическим покрытием, полученным с помощью метода диффузионного борирования, обладают ярко выраженной границей раздела. Решение задачи о деформировании такого рода материалов аналитическими методами не представляется возможным, поэтому для исследований выбран численный метод конечных разностей. Он позволяет с высокой точностью исследовать поведение композиции при различных видах нагрузки и спрогнозировать его поведение и прочностные характеристики в целом. Для описания деформирования материалов с криволинейной границей раздела «подложка – покрытие» используется общая система уравнений механики, включающую законы сохранения количества движения, массы, соотношения для деформаций и определяющие уравнения, описывающие среду. Система, дополненная граничными и начальными условиями, позволяет моделировать деформацию исследуемой композиции. В данном случае введены модели упругопластического поведения стальной подложки с учетом деформационного упрочнения, а также модель хрупкого разрушения покрытия. Краевая динамическая задача решается численно методом конечных разностей в постановке плоской деформации.

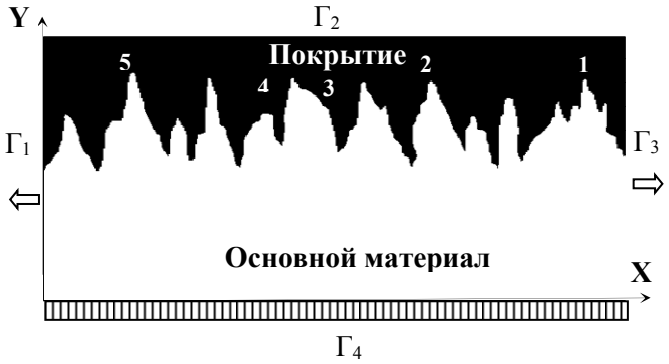


Рис.1 Схематическое изображение расчетной области и граничных условий.

Результаты моделирования. При нагружении композиции «стальная подложка – боридное покрытие» (рисунок 2) вдоль криволинейной границы раздела формируются концентрации напряжений различной мощности в зависимости от локальной геометрии.

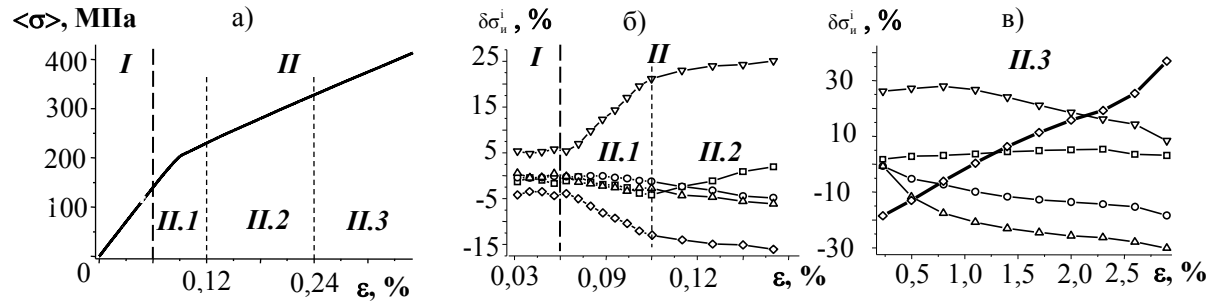


Рис.2 Кривая течения (а) и отклонение интенсивности напряжений в областях концентрации 1–5 от средней по данным областям на различных стадиях деформирования (б, в)

Выявлены три стадии пластического течения в стальной подложке: На стадии II.1 пластические сдвиги локализуются у основания зубьев, а основной объем подложки деформируется упруго (рис. 3а) и распространяются вглубь материала, первоначально заполняя пространство между зубьями и, далее, образуя полосы локализованного течения в основном материале. Данные полосы развиваются от

концентраторов напряжений в области границы раздела и локализуются в сопряженных направлениях под углом к оси нагружения. В момент образования полос макроскопическая кривая течения резко изменяет наклон (рис. 2а). Стадия II.1 заканчивается, когда основная часть подложки переходит в пластическое состояние и система полос сдвига окончательно сформирована.

При дальнейшем нагружении степень локализации в полосах сдвига усиливается – реализуется стадия II.2. Общий характер распределения интенсивности пластических деформаций меняется слабо, но система полос сдвига к окончанию данной стадии проявляется более четко Смена механизма локализации пластического течения на стадии II.3 (рис. 3, а–б) приводит к тому, что локализация напряжённого состояния на данной стадии развивается нелинейно (рис. 2в), причём в том месте, где на стадиях II.1 и II.2 концентрация напряжений была минимальной и локализация была подавлена (рис. 3, в–г).

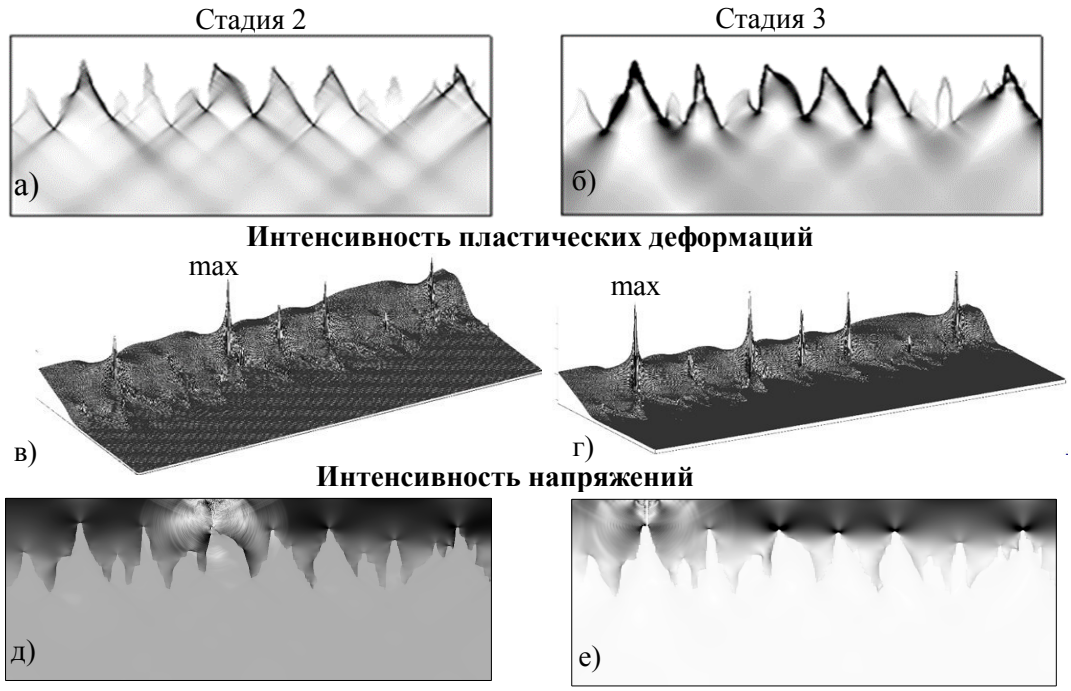


Рис. 3 Взаимосвязь эволюции концентраций напряжений и места разрушения покрытия со стадиями пластического течения в подложке

Таким образом, установлено, что максимальная концентрация напряжений может наблюдаться в различных местах вдоль границы раздела «покрытие–подложка» в зависимости от стадии деформирования композиционного материала. Это означает, что место разрушения может зависеть от того, на какой стадии деформирования оно произойдёт. Иными словами, предел прочности покрытия может определять место разрушения (рис. 3, д–е).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Погребняк А.Д., Шпак А.П., Азаренков Н.А., Береснев В.М. Структура и свойства твердых и сверхтвердых нанокомпозитных покрытий // Успехи физических наук. – 2009. – Т.179. – С. 35–64.

ВЛИЯНИЕ ХОЛОДНОЙ ПРОКАТКИ НА ЗАКОНОМЕРНОСТИ И МЕХАНИЗМЫ ДЕФОРМАЦИИ, СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛОВ СТАЛИ Fe-28Mn-2.6Al-1.3C

Е.В. Мельников[1], Г.Г. Майер[1], В.А. Москвина[2]

Научный руководитель: доцент, д.ф.-м.н. Е.Г. Астафурова

[1]Институт физики прочности и материаловедения СО РАН,

Россия, г. Томск, пр. Академический, 2/4, 634055

[2]Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: melnickow-jenya@yandex.ru

EFFECT OF COLD ROLLING ON CONSISTENT PATTERN AND MECHANISMS DEFORMATION, STRUCTURAL AND PHASE TRANSITIONS AND MECHANICAL PROPERTIES OF SINGLE CRYSTALS STEEL Fe-28Mn-2.6Al-1.3C

E.V. Melnikov[1], G.G. Maier[1], V.A. Moskvina[2]

Scientific supervisor: assistant professor, doctor of sciences (Phys & Math) E.G. Astafurova

[1]Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS,

Russia, Tomsk, Akademichesky pr. 2/4, 634055

[2]National Research Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: melnickow-jenya@yandex.ru

Abstract. *The dependence of microhardness of Fe-28Mn-2.6Al-1.3C single crystals on the degree of precipitation and deformation temperature is established. It can be divided into three sections: in sections I and III, the microhardness is slightly dependent on the orientation of the sample, while in section II the orientation dependence of microhardness is manifested. The orientation dependence of the microhardness is determined by the orientation dependence of the dislocation structure and the deformation mechanism (slip and / or twinning). Rolling does not lead to the realization of deformation phase transitions of steel Fe-28Mn-2.6Al-1.3C.*

Введение. Высокомарганцевые стали в настоящее время являются одним из самых востребованных конструкционных материалов в автомобильной промышленности, так как обладают комплексом физико-механических свойств, в частности, высокой прочностью, сопровождающейся хорошей пластичностью. Одним из ограничений в описании сталей выступает сложность микроструктуры. Разделить эффективность упрочнения от различных механизмов деформации (механическое двойникование, динамическое деформационное старение, дислокационное скольжение, мартенситное превращение, формирование кластеров точечных дефектов) при исследовании свойств поликристаллов достаточно сложно. Кроме того, исходные границы зерен в поликристалле, текстура, а также их эволюция в процессе деформации усложняют задачу интерпретации механизмов деформации и установления их взаимосвязи с механическими свойствами. На основании этого можно утверждать, что исследование монокристаллических материалов, в качестве модельных объектов, позволяет максимально исключить вклад в упрочнение от исходных границ зерен и изучить эволюцию структуры в пределах одного зерна.

Материалы и методы исследования. Из монокристаллических заготовок высокомарганцевой аустенитной стали Fe-28Mn-2.6Al-1.3C методом электроискровой резки были подготовлены образцы для прокатки вдоль разных кристаллографических направлений – <123>, <144>, <111>, <001>. Монокристаллы подвергали химической чистке, затем закаливали от температуры 1373 К. После закалки, сталь имела структуру аустенита с параметром решетки 0,365 нм. Закаленные монокристаллы шлифовали, электролитически полировали и прокатывали до нужных степеней деформации (осадки от 10 до 80 %) при комнатной температуре (Т=300 К) и с охлаждением до температуры жидкого азота между циклами прокатки (Т=77 К). Рентгеновские исследования проводили на дифрактометре ДРОН 7 с использованием *Co* излучения. Методом магнитофазового анализа на установке «Магнитометр Н-04» проводили количественный фазовый анализ (наличие α'-фазы) стальных монокристаллов после деформирования. Зеренную и дислокационную структуру изучали методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) на электронном микроскопе JEOL 2100 при ускоряющем напряжении 200 кВ. Микроиндентирование проводили на микротвердомере ПМТ-3 с нагрузкой Р=200 г.

Результаты исследования. Пластическая деформация способствует увеличению микротвердости (Hμ) монокристаллов. До 30 % осадки (участок I) при Т=300 К значение Hμ монокристаллов слабо зависит от ориентации (2,7-3,0 ГПа при 10 %; 3,0-3,3 ГПа при 30 %). С увеличением степени обжатия (от 30 до 70 %) (участок II) наблюдается ориентационная зависимость Hμ: наибольшие значения соответствуют <111>-ориентации (4,5 ГПа при 50 %), а наименьшие <123>-монокристаллам (3,5 ГПа при 50 %), величины Hμ для <001>, <144>- монокристаллов имеют промежуточные значения. При осадке более чем на 70 % (участок III) значения Hμ для всех исследуемых ориентаций становятся близки (5,0-5,4 ГПа при 70 %, 5,4-6,0 ГПа при 80 %). Для монокристаллов, прокатанных при Т=77 К, зависимость микротвердости от степени осадки имеет аналогичные закономерности, но участок II смещен в область меньших степеней деформации: участок I до 10 %, участок II – от 10 % до 70 %, участок III – от 70 % и выше. То есть понижение температуры прокатки способствует смещению области, где проявляется ориентационная зависимость Hμ, к меньшим степеням пластической деформации. Таким образом, зависимость значений Hμ от степени осадки можно разбить на три участка: на участках I и III микротвердость монокристаллов слабо зависит от исходной кристаллографической ориентации образца перед прокаткой, а на участке II проявляется ориентационная зависимость микротвердости. Следует отметить, что независимо от температуры деформации именно на участке II происходит наиболее сильное увеличение Hμ. При этом переход к участкам II и III происходит при близких значениях микротвердости (≈ 3,0 ГПа начало участка II, ≈ 5,5 ГПа конец участка II) как для деформации при Т=300 К, так и при Т=77 К. После того как значения микротвердости выходят на стадию III происходит насыщение, Hμ изменяется слабо с деформацией и мало зависит от температуры (6,0-6,5 ГПа).

Параметр решетки аустенита в стальных монокристаллах изменяется незначительно после деформационных обработок. Анализ рентгенограмм прокатанных образцов указывает на то, что независимо от ориентации монокристалла, степени осадки и температуры деформации сталь остается однофазной – наблюдаются рефлексы только от аустенитной фазы. Методом рентгенофазового и магнитофазового анализа не выявляли присутствие α'-фазы в стальных образцах независимо от их исходной ориентации, температуры и степени деформации. То есть холодная прокатка не приводит к реализации деформационных фазовых переходов в стали Fe-28Mn-2.8Al-1.3C.

С ранних степеней деформации в структуре стали развивается планарное скольжение – методом ПЭМ наблюдали формирование плоских скоплений дислокаций и сетчатую дислокационную структуру в монокристаллах, прокатанных при Т=300 К. Для монокристаллов, направление прокатки которых совпадает с кристаллографическим направлением <123>, при степенях осадки 10 % (участок I, где отсутствует ориентационная зависимость Нμ) преобладало планарное скольжение преимущественно в одной системе, а для других монокристаллов наблюдали сетчатую дислокационную структуру и плоские скопления дислокаций в нескольких системах. После осадки 30 %, во всех исследуемых ориентациях дислокационная структура была однородная, она представляла собой плотную дислокационную сетку (плотность дислокаций составляла $\sim 10^{14}$ м$^{-2}$). А на больших степенях деформации (более 50 %) происходила трансформация дислокационной структуры – наблюдали дислокационный хаос и редкие области, напоминающие дислокационные ячейки. После 80 % деформации плотность дислокаций была настолько велика, что ее сложно было оценить методом просвечивающей электронной микроскопии.

Дислокационное скольжение является основным механизмом деформации при прокатке монокристаллов всех исследуемых ориентаций до степеней осадки 30 %, по этой причине ориентационной зависимости микротвердости в этом интервале степеней деформации (участок 1, где отсутствует ориентационная зависимость микротвердости) не наблюдается. При более высоких степенях деформации (на участке II) в <111>-монокристаллах также наблюдали образование двойников деформации с толщиной пластин в диапазоне от 5 до 30 нм преимущественно в одной системе, хотя локально методом ПЭМ наблюдали и множественное двойникование. Пластическая деформация монокристаллов других ориентаций, по-прежнему, была связана с дислокационным скольжением. Таким образом, ориентационная зависимость дислокационной структуры и механизма деформации на участке II определяет различия в значениях микротвердости прокатанных монокристаллов – при развитии планарного скольжения преимущественно в одной системе в <123>-монокристаллах значения микротвердости имеют самые низкие значения, а множественное скольжение и формирование деформационных двойников обеспечивают самые высокие значения микротвердости после прокатки <111>-монокристаллов. На участке III, двойникование наблюдается во всех исследуемых ориентациях, но вклад его меньше, чем при деформации <111>-монокристаллов.

Понижение температуры деформации до температуры кипения жидкого азота способствует, во-первых, усилению планарности скольжения при 10 % осадки по сравнению со структурой, полученной при прокатке в условиях комнатной температуры. Во-вторых, двойникование в условиях деформации при температуре кипения жидкого азота активируется при меньших степенях деформации по сравнению с комнатной температурой: в <111>-монокристаллах методом ПЭМ двойники деформации обнаружены при 30 %, а при степенях деформации 70 и 80 % двойникование наблюдается во всех ориентациях. Согласно данным ПЭМ, даже после 80 % осадки не происходит формирования деформационных высокоугловых границ (кроме двойниковых), формируется структура с высокой плотностью дислокаций, малоугловыми границами дислокационного происхождения и двойниковыми границами.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ № 16-38-00232-мол_а. Исследования проведены с использованием оборудования ЦКП научным оборудованием БелГУ «Диагностика структуры и свойств наноматериалов» и ЦКП ИФПМ СО РАН «Нанотех».

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ПРОКАТКИ НА СТРУКТУРУ, МЕХАНИЗМЫ ДЕФОРМАЦИИ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СТАЛИ 01Х17Н13М3, ЛЕГИРОВАННОЙ ВОДОРОДОМ

Е.В. Мельников[1], Г.Г. Майер[1], В.А. Москвина [2]

Научный руководитель: доцент, д.ф.-м.н. Е.Г. Астафурова

[1]Институт физики прочности и материаловедения СО РАН,

Россия, г. Томск, пр. Академический, 2/4, 634055

[2]Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: melnickow-jenya@yandex.ru

INFLUENCE OF ROLLING TEMPERATURE ON STRUCTURE, DEFORMATION MECHANISMS AND MECHANICAL PROPERTIES OF Fe-17Cr-13Ni-3Mo-0.01C STEEL ALLOYING WITH HYDROGEN

E.V. Melnikov[1], G.G. Maier[1], V.A. Moskvina[2]

Scientific supervisor: assistant professor, doctor of sciences (Phys & Math) E.G. Astafurova

[1]Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS,

Russia, Tomsk, Akademichesky pr. 2/4, 634055

[2]National Research Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: melnickow-jenya@yandex.ru

Abstract. *Chemical-deformation treatment of Fe-17Cr-13Ni-3Mo-0.01C steel leads to refinement of the structure, formation of a high density of twin boundaries and increase in strength properties. Hydrogenation and lowering of rolling temperature both contribute to hardening of the steel, which is caused by a dislocation slip, an increase in the density of twin boundaries and phase transformations. The formation of a strain-induced ε-martensitic phase was observed but their fraction in the structure of steel is low. Lowering of rolling temperature activates an γ-α' transformation, but α'-phase fraction does not exceed 5%.*

Введение. В последние годы активно идет разработка и внедрение альтернативных источников энергии, в частности, речь идет о водородной энергетике. Это требует детальной проработки механизмов деформации и разрушения аустенитных сталей, которые в перспективе могут быть использованы для транспортировки водорода и изготовления оборудования. В связи с этим в работе исследовали влияние температуры прокатки, комбинированной с наводороживанием, на структуру, механизмы деформации и механические свойства коррозионостойкой стабильной аустенитной стали 01Х17Н13М3.

Материалы и методы исследования. Для исследований была выбрана промышленно используемая аустенитная нержавеющая сталь 01Х17Н13М3. Образцы для испытаний вырезали на электроискровом станке в форме прямоугольных пластин. После химической чистки (2 части HNO_3 + 3 части HCl), механической шлифовки и электролитической полировки (25 гр CrO_3 + 210 мл H_3PO_4) они имели размер 15×10×1 мм. Химико-деформационную обработку (ХДО), заключающуюся в многоходовой прокатке наводороженных и не наводороженных образцов, проводили с использованием настольных электромеханических вальцов до степеней обжатия 25-85 %. Электролитическое насыщение образцов водородом осуществляли в 1N растворе серной кислоты (H_2SO_4) с добавлением тиомочевины

(CH_4N_2S) при комнатной температуре и плотности тока 10 и 200 мА/см^2 в течение 5 часов. Образцы прокатывали при комнатной температуре (T=300 K) и с охлаждали до температуры жидкого азота (T=77 K) перед каждым циклом прокатки. Степень обжатия рассчитывали как $\varepsilon = ((h_1-h_0)/h_0)*100$ %, где h_0 – исходная толщина пластинки, h_1 – толщина пластинки после прокатки. Деформация при одном проходе образцов через валки прокатного стана составляла ≈ 3-4 %.

Исследование фазового состава и структурных параметров стали проводили на дифрактометре Rigaku Ultima IV с использованием CuK_α излучения. Количество образовавшегося при прокатке стали α'-мартенсита также определяли методом изменения удельной намагниченности в зависимости от напряжения магнитного поля на установке «Магнитометр Н-04». Зеренную и дислокационную структуру изучали методом анализа картин дифракции обратно рассеянных электронов (ДОЭ) с использованием сканирующего электронного микроскопа Quanta 600 FEG при ускоряющем напряжении 30 кВ с гексагональной постановкой точек и шагом 0.05-0.15 мкм и просвечивающего электронного микроскопа (ПЭМ) JEM-2100 при ускоряющем напряжении 200 кВ. Образцы утоняли механической шлифовкой до 0.13-0.15 мм, а затем струйной полировкой в растворе 400 мл ледяной уксусной кислоты и 80 г $HClO_4$.

Механические свойства стали исследовали на микротвердомере ПМТ-3 с нагрузкой P=200 г и на испытательной машине Instron 3369 (одноосное статическое растяжение) при комнатной температуре со скоростью 4.2×10^{-4} с$^{-1}$. Образцы вырезали из обработанных заготовок в форме двойных лопаток.

Результаты исследования. Анализ ДОЭ-картин и ПЭМ-изображений показал, что ХДО приводит к деформации и фрагментации зерен аустенита – формируется зеренно-субзеренной структура с высокой плотностью дислокаций (~ 10^{15} м$^{-2}$), реализуется деформация скольжением, механическим двойникованием и происходит формирование полос локализованного течения различного масштаба. Линейная плотность двойниковых границ возрастает от ~ 10^4 м$^{-1}$ (в исходном состоянии) до ~ 10^6 м$^{-1}$ (после ХДО). Электронно-микроскопические данные свидетельствуют о том, что с повышением плотности тока при наводороживании, увеличением степени обжатия при деформации и понижением температуры прокатки происходит уменьшение толщины двойниковых пластин, возрастает линейная плотность двойниковых границ и плотность дислокаций, что способствует большей фрагментации структуры. Легирование водородом и понижение температуры прокатки способствует образованию α' и ε мартенситных фаз – на микродифракционных картинах наблюдали соответствующие рефлексы.

Рентгенофазовый анализ образцов стали 01Х17Н13М3 не выявил наличие α' и ε мартенситных фаз – на рентгенограммах наблюдаются рефлексы только от γ-фазы. Методом магнитофазового анализа в образцах, прокатанных при 77 K, была обнаружена небольшая доля магнитной α'-фазы, ее содержание возрастает с увеличением степени деформации, но не превышает 5 %. То есть понижение температуры прокатки способствует образованию деформационного α′-мартенсита в стабильной стали 01Х17Н13М3. Интенсивность пиков уменьшается с увеличением степени деформации, а их ширина увеличивается. Рентгеноструктурный анализ показал, что размеры областей когерентного рассеяния уменьшаются с деформацией до нескольких десятков нанометров (>200 нм в исходном состоянии), а микродеформация кристаллической решетки возрастает на порядок (с ~ 10^{-4} до ~ 10^{-3}). При деформации параметр решетки стали изменяется незначительно. Микронапряжения второго рода (σ_{II}), возникающие в образцах стали после ХДО, возрастают с увеличением степени деформации и с понижением температуры прокатки. Все это свидетельствует о деформации и фрагментации структуры, повышении внутренних напряжений.

В исходном состоянии, после закалки, аустенитная сталь 01Х17Н13М3 имеет микротвердость Нμ ≈ 2.2 ГПа. При прокатке, с увеличением степени обжатия, ростут и значения микротвердости, а понижение температуры деформации способствует дополнительному приросту Нμ стали. Введение водорода перед прокаткой на 25 % приводит к снижению микротвердости. При насыщении водородом и прокатке на 50 % значения микротвердости увеличиваются по сравнению с образцами, прокатанными без наводороживания.

В исходном состоянии исследуемая сталь характеризуются низкими значениями предела текучести, предела прочности и большой пластичностью (таблица 1). Как показали механические испытания на статическое растяжение, прокатка (ε=50 %) способствует повышению прочностных свойств (пределов текучести, пределов прочности) и снижению пластичности стали (таблица 1) по сравнению с исходно закаленным состоянием. Понижение температуры деформации сопровождается повышением предела текучести, предела прочности и понижением пластичности сталь 01Х17Н13М3 (таблица 1) по сравнению с образцами стали, прокатанными при комнатной температуре. Предварительное легирование водородом приводит к дополнительному росту прочностных свойств и снижению пластичности по сравнению с образцами, прокатанными без наводороживания (таблица 1). Повышение плотности тока при наводороживании перед деформацией, сопровождается снижением предела текучести, предела прочности и увеличение пластичности (таблица 1).

Таблица 1

Механические свойства стали 01Х17Н13М3 в исходном состоянии и после ХДО

ХДО	Механические свойства				
	σ_0, МПа	$\sigma_{0.1}$, МПа	σ_B, МПа	δ, %	Нμ, ГПа
исходный	350±18	375±19.22	665±11	65.0±1.4	2.17±0.09
ε=50 %, Т=300 К	970±20	1080±17	1150±11	10.0±0.3	3.53±0.23
10 мА/см^2, ε=50 %, Т=300 К	1065±28	1150±21	1220±15	7.5±0.4	3.74±0.21
200 мА/см^2, ε=50 %, Т=300 К	1030±26	1100±15	1170±13	9.5±0.3	3.92±0.23
ε=50 %, Т=77 К	1150±20	1200±19	1270±11	7.5±0.4	4.09±0.19
10 мА/см^2, ε=50 %, Т=77 К	1180±2	1270±22	1340±12	7.2±0.4	3.86±0.19
200 мА/см^2, ε=50 %, Т=77 К	1140±28	1220±21	1310±13	7.8±0.3	4.19±0.21

Заключение. Химико-деформационная обработка стали 01Х17Н13М3 приводит к формированию зеренно-субзеренной структуры с высокой долей двойниковых границ. Увеличение степени осадки, наводороживание и понижение температуры прокатки способствует росту линейной плотности двойниковых границ. Электронно-микроскопически наблюдали образование ε-мартенсита в структуре стали, но его доля в структуре стали мала. Методом магнитофазового анализа в образцах, прокатанных с охлаждением до температуры жидкого азота, была обнаружена небольшая доля α'-фазы, ее содержание не превышает 5 %. Прокатка сопровождается увеличением прочностных характеристик и снижением пластичности стали. Наводороживание и понижение температуры деформации способствует дополнительному упрочнению стали, что вызвано увеличением линейной плотности двойниковых границ и фазовыми переходами.

Работа выполнена при финансовой поддержке стипендии Президента (СП-419.2015.1). Исследования проведены с использованием оборудования ЦКП научным оборудованием БелГУ «Диагностика структуры и свойств наноматериалов» и ЦКП «Нанотех» ИФПМ СО РАН.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА

О. Мендоса, И.Ю. Новоселов

Научный руководитель: д.ф.-м.н, И.В. Шаманин

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: kiros@tpu.ru

MODELLING OF THERMAL-PHYSICAL PROPERTIES OF COMPOSITE MATERIAL

O. Mendosa, I.Yu. Novoselov

Scientific Supervisor: Prof., Dr. I.V. Shamanin

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

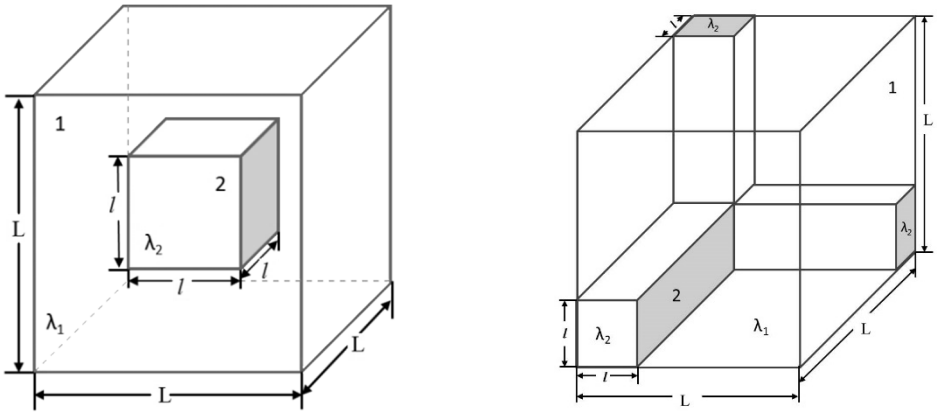
E-mail: kiros@tpu.ru

Abstract. *Article represents theoretical determination of effective heat conductivity of composite materials. Authors describe PC program written with Visual Basic for calculation of heat conductivity of composite materials. There is particular focus on various methods for calculation of heat conductivity of composite materials in accordance with offered models and on comparison between calculated and experimental data.*

Введение. Композиционные материалы получают путем соединения двух или более материалов для достижения свойств (жесткость, прочность, тугоплавкость, сопротивление коррозии, твердость, теплопроводность и т.д.), которые не могут быть получены в исходных материалах по отдельности. Основой композиционных материалов является сравнительно пластичный материал, называемый матрицей. В матрице равномерно распределены более твердые и прочные вещества, называемые упрочнителями или наполнителями. Матрица может быть металлической, полимерной, углеродной или керамической. По типу упрочнителя композиционные материалы делятся на дисперсно-упрочненные, в которых упрочнителем служат дисперсные частицы оксидов, карбидов, нитридов, боридов и других тугоплавких соединений, а также интерметаллических соединений.

Целью данной работы является теоретическое исследование по определению теплофизических свойств композиционных материалов на основе матрицы с теплопроводностью выше теплопроводности включения.

Используемые методы и модели. Для расчёта коэффициента теплопроводности элементарной ячейки композиционного материала λ, зависящего от размера блоков 1 и 2 [1,2] (рис. 1), в среде Visual Basic написана программа, которая позволяет автоматизировать расчёты. Коэффициент теплопроводности элементарной ячейки λ зависит от коэффициента теплопроводности λ_1 материала блока 1 и коэффициента теплопроводности λ_2 материала блока 2.



а) *б)*

Рис. 1. Модели элементарной ячейки: с вкраплениями (а), с взаимопроникающими компонентами (б)

Расчеты коэффициента теплопроводности композиционного материала элементарной ячейки λ производились с использованием следующих моделей: модели с замкнутыми включениями с дроблением ячейки адиабатическими плоскостями; модели с замкнутыми включениями с дроблением ячейки изотермическими плоскостями; модели с замкнутыми включениями Оделевского; модели с взаимопроникающими компонентами с дроблением ячейки адиабатическими плоскостями; модели с взаимопроникающими компонентами с дроблением ячейки изотермическими плоскостями; комбинированной модели; модели обобщенной проводимости Лихтенеккера для смесей с неравноправными компонентами при параллельной ориентации пластин; модели обобщенной проводимости Лихтенеккера для смесей с неравноправными компонентами при перпендикулярной ориентации пластин; модели обобщенной проводимости Лихтенеккера для смесей с равноправными компонентами (форма включения – квадрат); модели для многокомпонентных смесей.

Для расчёта по формуле любой модели обязателен ввод коэффициентов теплопроводности, плотностей, масс или объёмных концентраций. Для осуществления расчётов по формулам некоторых моделей обязателен ввод дополнительных параметров (например, вероятности того, что пластины перпендикулярны потоку – для модели обобщённой проводимости Лихтенеккера).

Для проверки адекватности моделей были проведены расчеты коэффициентов теплопроводности λ для элементарных ячеек, состоящих из меди (блок 1) и молибдена (блок 2) и их сравнение с экспериментальными данными.

Сопоставление результатов. Проанализировав расчетные данные по значениям коэффициентов теплопроводности композиционного материала λ для случаев $\lambda_1 > \lambda_2$ (таблица 1), сравним полученные из расчетов значения коэффициентов теплопроводности λ с экспериментальными данными [3].

Таблица 1

Свойства компонентов в элементарной ячейке при средней температуре 300 К

блок 1 – Cu	$\lambda_1 = 400$ Вт·(м·К)$^{-1}$
блок 2 – Mo	$\lambda_2 = 138$ Вт·(м·К)$^{-1}$
$300 \le L \le 600$ мкм	$100 \le l \le 400$ мкм

На рисунке 2 показаны зависимости коэффициента теплопроводности композиционного материала λ от размеров блоков 1 и 2 элементарной ячейки. График отображает корреляцию

зависимостей коэффициента теплопроводности λ, построенных на основании теоретических расчетов (по различным моделям) с экспериментальными данными.

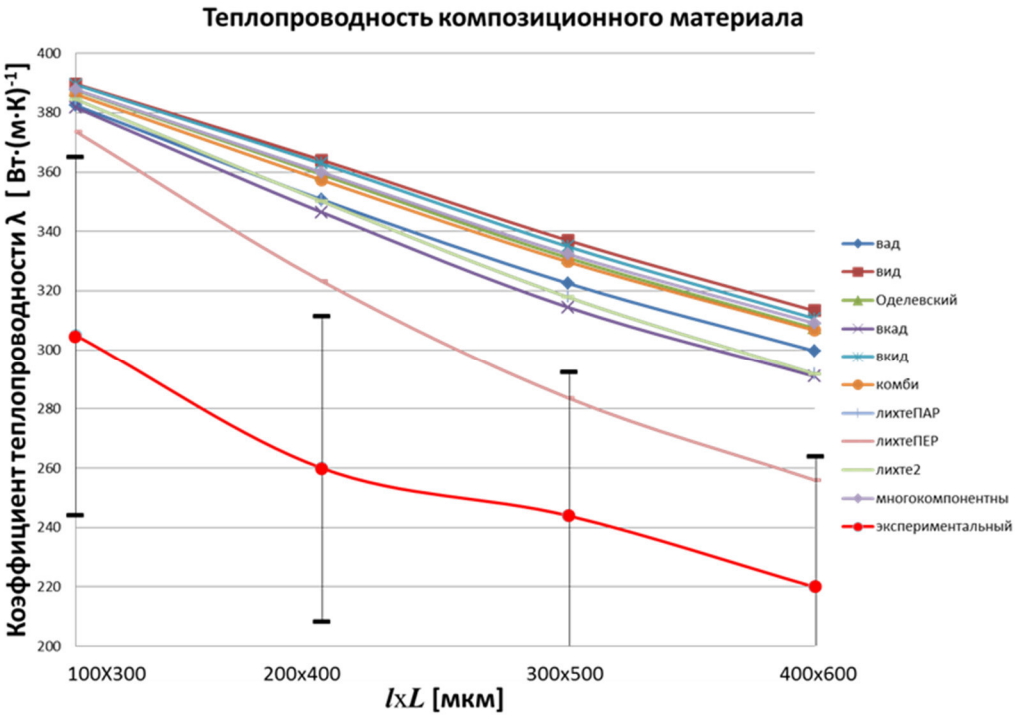


Рис. 2. Зависимость коэффициента теплопроводности композиционного материала λ от размеров блоков 1 и 2 элементарной ячейки, материал блока 1 – Cu, блока 2 – Mo

Из графика (рис. 2) следует, что характер зависимости коэффициента теплопроводности λ от размеров блоков 1 и 2 элементарной ячейки на основе теоретических (расчетных) данных совпадает с характером зависимости на основе экспериментальных данных, при этом разрыв между расчетами и экспериментами составляет около 20 %. Следует отметить, что наиболее приближенно экспериментальные данные описываются моделью Лихтенеккера для смесей с неравноправными компонентами при перпендикулярной ориентации пластин.

Заключение. В результате проведенных исследований установлено, что расчетный коэффициент теплопроводности композиционного материала λ уменьшается с уменьшением отношения *L/l* для элементарной ячейки. Заниженные экспериментальные значения коэффициента теплопроводности λ, могут быть обусловлены примесями и дефектами, присутствующими в композиционном материале. Наиболее адекватно экспериментальные данные описывает модель обобщенной проводимости Лихтенеккера для смесей с неравноправными компонентами при перпендикулярной ориентации пластин.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Грахов Д.В., Ягупов А.И., Бекетов А.Р., Баранов М.В. Теплопроводность полимерного композита AlN – ЛАК КО-916К // Современные проблемы науки и образования. – 2011. – № 5.
2. Дульнев Г.Н, Заричняк Ю. П. Теплопроводность смесей и композиционных материалов. Справочная книга. – Л.: Энергия, 1974. – 264 с.
3. Бондарь Д. Металлические и композитные теплопроводящие материалы для мощных полупроводниковых корпусов // Компоненты и технологии. – 2014. – №12. – С. 155-162.

МЕТОД ИЗМЕНЕНИЯ СВОЙСТВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ С ИОНИЗИРУЮЩИМ ИЗЛУЧЕНИЕМ

И.А. Милойчикова, М.А. Переверзева, Д.В. Журавлев
Научный руководитель: к.ф.-м.н. С.Г. Стучебров
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050
E-mail: miloichikova@gmail.com

METHOD OF PROPERTIES CHANGING OF POLYMERIC MATERIAL INTERACTION WITH IONIZING RADIATION

I.A. Miloichikova, M.A. Pereverzeva, D.V. Zhuravlev
Scientific Supervisor: PhD S.G. Stuchebrov
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050
E-mail: miloichikova@gmail.com

Abstract. *This paper describes the method of the new materials with specific properties creation based on PLA-plastic alloy of copper, iron, tungsten, lead or zinc and the filaments production for additive technologies application. The maximum possible concentrations of impurities in the plastic were determined. Created set of samples with defined parameters is useful for analysis of new material interaction with ionizing radiation.*

Введение. Повсеместное распространение аддитивных технологий позволяет находить новое применение изделий изготовленных методом послойного наплавления [1]. Одним из перспективных направлений является медицинская сфера. В работе [2] авторами предложен способ проведения экспериментальной верификации планирования лучевой терапии, основанный на изготовлении индивидуальных фантомов, имитирующих соответствующие плотности тканей человека. Для экспериментальной реализации данного способа необходимо разработать новые материалы с заданными свойствами взаимодействия с ионизирующим излучением, пригодные для изготовления изделий методом послойного наплавления. Данная работа направлена на разработку метода создания материалов с определенной плотностью на основе ПЛА-пластика с примесями меди, железа, вольфрама, свинца или цинка и последующего изготовления из них филаментов для устройств быстрого прототипирования.

Материалы и методы. На первом этапе исследования был проведен расчет зависимости плотности тестовых материалов от объёмного соотношения металлического порошка к пластику:

$$\rho = \rho_{ПЛА} + n(\rho_{Me} - \rho_{ПЛА}), \quad (1)$$

где $n = \frac{V_{ПЛА}}{V_{Me} + V_{ПЛА}}$ – соотношение объемов материалов, $V_{ПЛА}$ – объём пластика, V_{Me} – объём металлического порошка, $\rho_{ПЛА}$ – плотность ПЛА-пластика, ρ_{Me} – плотность металла.

На рисунке 1 приведена зависимость плотности некоторых составных материалов от соотношения объёмов пластикового порошка и медной, железной и цинковой примесей.

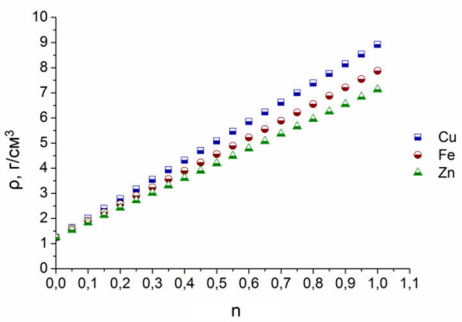


Рис. 1. Зависимость плотности тестового материала от соотношения объёмов пластика и металлов

Для создания филамента пригодного для изготовления образцов методом послойного наплавления необходимо разработать тестовый материал с заданной плотностью путем равномерного смешивания ПЛА-пластика и металлического порошка. Наиболее оптимальным методом является сплавление пластиковой и металлической масс в пластографе EC plus с последующим измельчением смеси и изготовлением из нее нити филамента с помощью экструдера BestRuder [3, 4].

Результаты и обсуждения. Для оптимизации процесса изготовления тестовых материалов был проведен обзор литературы по данному вопросу. Как известно, с повышением температуры вязкость расплава снижается, следовательно, увеличивается показатель текучести расплава (ПТР). В работах [5, 6] показана зависимость показателя текучести расплава термопластической массы от температуры (рисунок 2). Авторами [6] была получена зависимость изменения массы пластика, не потерпевшего термодеструкции, от температуры (рисунок 3).

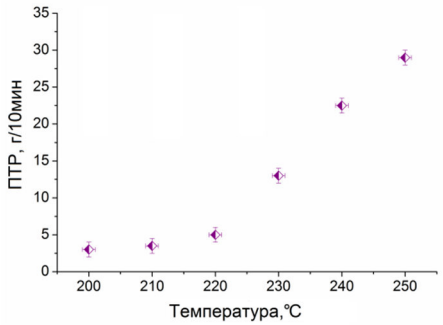


Рис. 2.Температурная зависимость показателя текучести расплава пластика

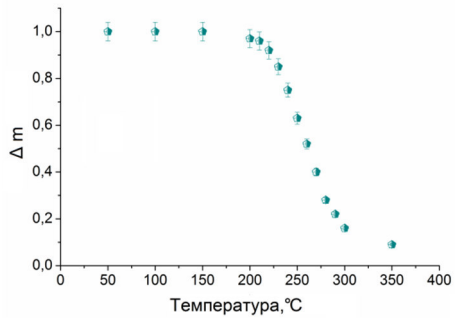


Рис. 3. Температурная зависимость массы пластика, не потерпевшего термодеструкции

Из рисунка 3 видно, что незначительно превышение температуры приводит к большому процентному разрушению пластика, термодеструкции и значительному разрушению материала, что делает его непригодным для дальнейшей работы [6].

Для получения равномерной смеси при плавке пластика, с добавлением в него металлического порошка, необходимо увеличить его текучесть и поддерживать её на заданном уровне. Из рисунка 2 видно, что повышение показателя текучести расплава пластика происходит примерно при 220°C, для экспериментально изготовления смеси оптимальная температура составляла 230°C. При данной температуре наблюдается незначительное термическое разрушение пластика ≈ 10% от общей массы. Контроль температуры в пластогрофе EC plus позволил получить равномерную смесь при плавке

ПЛА-пластика, с добавлением в него металлических примесей. На экспериментальном этапе создания тестовых материалов выяснилась, что некоторые из металлов, выбранные для изготовления новых материалов, являются химически несовместимыми с пластиком. Минимальное добавление вольфрамовой и свинцовой примеси приводит к разрушению сил Ван-дер-Ваальса, удерживающих макромолекулы термопласта в относительной связи друг с другом, вызывая деструкцию материала. Такой же эффект наблюдался при превышении в смеси концентрации цинка более 20% и железа более 40%. Медь оказалась наиболее оптимальной примесью для создания новых материалов с заданной плотностью. Концентрация меди в смеси составляла не менее 70%, при последующем увеличении концентрации возникала проблема удержания примеси пластиком в связи с его недостатком.

Тестовые материалы были получены в виде пластин (рисунок 4), для анализа физико-механических свойств образцов и их взаимодействия с разными видами ионизирующих излучений, а так же в виде готового сырья для дробления на гранулы. Из полученных гранул были изготовлены филаменты с помощью экструдера BestRuder.

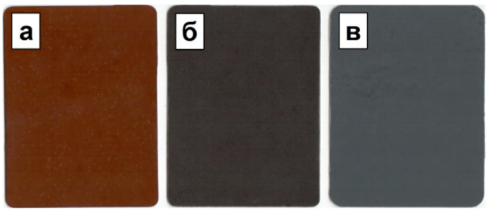


Рис. 4.Тестовые материалы из ПЛА-пластика и а –70%Cu, б – 40%Fe, в – 20%Zn

Заключение. В рамках данной работы были получены филаменты из тестовых образцов ПЛА-пластика с примесями меди, железа и цинка разной концентрации. Этот результат позволит изготавливать изделия из созданных материалов методом послойного наплавления и проводить анализ их физико-механических свойств, а так же изучение характера их взаимодействия с разными видами ионизирующих излучений.

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. 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. Plastograph EC plus [Электронный ресурс]. – Режим доступа:http://plastic.brabender.ru/.
4. Мобильный экструдер BestRuder [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://bestfilament.ru/mobilnyy-ekstruder-dlya-proizvodstva-3d-prutka-filamentator/.
5. Пластмассы. Метод определения показателя текучести расплава термопластов: ГОСТ 11645–73. – Взамен ГОСТ11645–65; введ. 01.01.1977. – М.: Изд-во стандартов, 1994. – 12 с.
6. Abdullin M.I., Basyrov A.A., Nikolaev S.N., Koksharova Y.A., Koltaev N.V. Defining the Conditions of 3D Printing Using Abs Plastic / /European reviews of chemical research. – 2014. – №. 1. – P. 4–9.

ТЕКУЩИЙ СТАТУС ПРОЕКТА УСТАНОВКИ НЗТ НА ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОМ ЯДЕРНОМ РЕАКТОРЕ ИРТ-Т

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 CURRENT STATUS OF BNCT FACILITY AT THE IRT-T RESEARCH REACTOR

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 the IRT-T research reactor as a neutron source for Boron Neutron Capture Therapy (BNCT) has been performed by calculating «in air» parameters at the HEC-1 exit. The designed epithermal neutron flux is ~$2 \cdot 10^8$* n/sm^{2}s *in air at the beam exit, accompanied by photon and fast neutron absorbed dose rates of 10^{-12} Gy·sm^2 per one epithermal neutron. Obtained results have shown that the further modernization of the horizontal experimental channel HEC- 1 is necessary for BNCT-applications.*

Введение. В 2015 г. в Российской Федерации выявлено 589 341 случай злокачественных новообразований (в том числе 270 046 и 319 335 у пациентов мужского и женского пола соответственно). Прирост данного показателя по сравнению с 2014 г. составил 4,0%. В структуре смертности населения России злокачественные новообразования занимают второе место (15,5% в 2015 г.; в 2014 г. данный показатель составлял 15,3%) после болезней системы кровообращения [1]. Среди применяемых методов лечения злокачественных новообразований, на сегодняшний день лучевая терапия является наиболее востребованным методом. В свою очередь, одним из перспективных, но одновременно и наиболее трудных методов является нейтрон-захватная терапия (НЗТ).

Отрицательным свойством традиционно используемой конвенциональной лучевой терапии является то, что при облучении опухоли также поражаются здоровые ткани, особенно когда опухоль имеет сложную конфигурацию и локализацию.

Бор-нейтрон-захватная терапия – бинарная технология лучевой терапии, основанная на возможности изотопа ^{10}B поглощать тепловые нейтроны в результате реакции $^{10}B(n,\alpha)^7Li$. Продукты данной реакции быстро тормозятся и выделяют энергию 2,3 МэВ на длине ~10 мкм, что обеспечивает возможность селективного поражения раковых клеток.

Нейтрон захватная терапия является перспективным методом лечения агрессивных форм злокачественных опухолей [2], резистентных к существующим методам лучевой терапии, таких как: глиобластомы мозга, метостазы меланомы и др. В стадии изучения находится бор нейтрон захватная терапия рака полости рта, рака щитовидной железы и неонкологическое применение НЗТ – лечение ревматического артрита.

В настоящее время проблемами нейтрон-захватной терапии занимаются практически все страны, на территории которых имеются исследовательские ядерные реакторы. Большое внимание к НЗТ проявлено отечественными исследователями. На исследовательском ядерном реакторе ИРТ-МИФИ создана экспериментальная облучательная база для предклинических исследований НЗТ. Начата эксплуатация радиобиологического канала ГЭК 4 для НЗТ, на котором успешно прошли лечение более 100 домашних животных со спонтанной меланомой, остеосаркомой и другими видами злокачественных новообразований. Разработан проект клинического канала ГЭК-1 на тепловой колонне реактора ИРТ МИФИ для НЗТ. В Обнинске развивается проект медицинского комплекса на реакторе ВВРц и реакторной установке «МАРС».

Для проведения НЗТ мировым сообществом выработаны требования к радиационным характеристикам поля излучения пучка, степень выполнения которых характеризует качество данного пучка по отношению к НЗТ. Критерии качества делятся на первичные и вторичные [3]. Первичные критерии качества «in phantom» характеризуют воздействие излучений пучка на орган или ткань. Это дозиметрические величины в облучаемой опухоли и ткани. Вторичные критерии качества «in air» относятся собственно к излучению пучка, предназначенного для НЗТ. Вторичные критерии определяются по физическим характеристикам поля излучения на выходе пучка. Эти характеристики локализуются в районе операционного поля, но в отсутствии облучаемого объекта. Вторичные критерии качества позволяют сравнивать качество выводимых пучков и непосредственно фигурируют в качестве ограничений в задачах оптимизационных характеристик выводимого пучка. Рекомендуемые МАГАТЭ вторичные критерии качества выводимого пучка:

– Плотность потока эпитепловых нейтронов $\Phi_{epi} > 1,0 \cdot 10^{9}$ см$^{-2}$с$^{-1}$;

– Мощность поглощённой дозы гамма-излучения на один эпитепловой нейтрон $D_{\gamma} / \Phi_{epi} < 2,0 \cdot 10^{-13}$ Гр$\cdot$см^{2};

– Мощность поглощённой дозы быстрых нейтронов на один эпитепловой нейтрон $D_{fast} / \Phi_{epi} < 2,0 \cdot 10^{-13}$ Гр$\cdot$см^{2};

– Отношение аксиального тока эпитепловых нейтронов к потоку $J_{epi} / \Phi_{epi} < 0,7$.

Материалы и методы исследования. Для оценки возможности создания установки НЗТ на исследовательском реакторе ИРТ-Т были рассчитаны вторичные критерии качества выводимого пучка с помощью прецизионной программы MCU-PTR [4] в которой была разработана полномасштабная нейтронно-физическая модель активной зоны реактора ИРТ-Т [5], включающая подробную проработку горизонтального канала ГЭК-1, касательного к активной зоне. Целесообразность такого подхода обусловлена тем, что пучок, имеющий лучшие характеристики по вторичным критериям относительно НЗТ, имеет и лучшие характеристики по первичным дозиметрическим характеристикам.

Основные характеристики расчета:

– Константное обеспечение расчета процессов переноса нейтронов и фотонов осуществлено с помощью библиотеки оцененных нейтронно-физических данных MDBPT50.
– Перевод плотности потоков нейтронов и фотонов в дозы был осуществлен с помощью коэффициентов перевода согласно стандарту ANSI/ANS-6.1.1-1977.

– Использование различных способов неаналогового моделирования, для уменьшения дисперсии результатов. К числу таких способов относились расщепление и русская рулетка, использование функций ценности отдельных расчетных ячеек, локальная оценка потока.

Результаты. Плотность потока тепловых нейтронов на выходе из канала составляет ~$1 \cdot 10^9$ н/см^{2}с, что позволяет проводить исследования по взаимодействию излучения с клеточными структурами, а также испытывать препараты, содержащие бор и другие сильнопоглощающие элементы на мелких животных. Подобные эксперименты позволят проводить оценки эффективности существующих препаратов для НЗТ.

Расчетная плотность потока эпитепловых нейтронов составляет ~$2 \cdot 10^8$ н/см^{2}с. Согласно требованиям к нейтронным пучкам, выработанным мировым сообществом, желательная плотность потока эпитепловых нейтронов должна составлять ~10^9 н/см^{2}с. Величины ~10^8 являются приемлемыми, но приводят к значительному увеличению времени облучения пациента. В настоящий момент, используя накопленный мировой опыт в повышении эффективности использования канала для облучения биологических объектов, проводятся расчетные исследования по определению оптимальной конструкции устройств, формирующих выходной пучок нейтронов.

Отношение мощности поглощенной дозы гамма-излучения и быстрых нейтронов на один эпитепловой нейтрон составляют величины порядка 10^{-12} Гр·см^2.

Заключение. Характеристики выводимого пучка, ориентированные на НЗТ, не удовлетворяют вторичным критериям качества, установка будет конкурентоспособной только после проведения модернизации горизонтального канала ГЭК-1. Используя накопленный мировой опыт в повышении эффективности использования канала для облучения биологических объектов можно значительно увеличить значения вторичных критериев качества. В настоящее время проводится модернизация комплекса биологической защиты горизонтального экспериментального канала ГЭК-1 реактора ИРТ-Т, которая позволит организовать облучательную камеру для проведения широкого спектра работ в области изучения воздействия ионизирующего излучения на биологические объекты. Также проводятся расчетные исследования по определению оптимальной конструкции устройств, формирующих выходной пучок нейтронов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Чиссов В. И., Старинский В. В., Петрова Г. В. Злокачественные новообразования в России в 2015 году (заболеваемость и смертность) //М.: ФГБУ «МНИОИ им. ПА Герцена» Минздравсоцразвития России. – 2017. – С. 4.
2. Barth R. F. et al. Boron neutron capture therapy of cancer: current status and future prospects //Clinical Cancer Research. – 2005. – Т. 11. – №. 11. – P. 3987-4002.
3. International Atomic Energy Agency (IAEA), Current status of neutron capture therapy, in IAEA-Tecdoc-1223. 2001, IAEA: Wien.
4. 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.
5. Варлачев В. А. и др. Исследовательский ядерный реактор ИРТ-Т //Томск: Изд-во ТПУ. – 2002.

ЭЛЕКТРОННО-МИКРОСКОПИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ФАЗОВОГО СОСТАВА ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ ИОННО-АЗОТИРОВАННОЙ АУСТЕНИТНОЙ СТАЛИ

В.А. Москвина[1], Г.Г. Майер[2], Е.В. Мельников[2]

Научный руководитель: доцент, д.ф.-м.н. Е.Г. Астафурова[2]

[1]Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

[2]Институт физики прочности и материаловедения СО РАН,

Россия, г. Томск, пр. Академический, 2/4, 634055

E-mail: valya_moskvina@mail.ru

ELECTRON MICROSCOPIC ANALYSIS OF STRUCTURE AND PHASE COMPOSITION OF SURFACE LAYER AUSTENITIC STEEL AFTER ION NITRIDING

V.A. Moskvina[1], G.G. Maier[2], E.V. Melnikov[2]

Scientific Supervisor: assistant professor, doctor of sciences (Phys & Math) E.G. Astafurova[2]

[1]National Research Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

[2]Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Russia, Tomsk, Akademichesky pr. 2/4, 634055

E-mail: valya_moskvina@mail.ru

Abstract. *Structure and phase composition of surface layer of ion-nitrided austenitic stainless were investigated. Nitriding causes a surface hardening of steel specimens, changes phase composition, microstructure and formation of an inhomogeneous composite layer consisting of nitrided layer (22 − 27 μm), diffusion zone with a solid solution hardening and nitrides (≈40 μm) and an austenitic matrix.*

Введение. Азот в малых количествах всегда присутствует в сталях, в частности, содержание этого элемента может зависеть от способа выплавки и химического состава. Специальное введение азота в стали аустенитного класса способствует ряду структурно-фазовых изменений – образованию нитридов легирующих элементов (Ti, Cr и др.) вследствие высокого сродства азота с этими элементами – и к повышению износостойкости и твердости стали [1,2]. Однако за этим следует обеднение твердого раствора по хрому, и как следствие, снижение ее коррозионной стойкости, а также нежелательное образование α-Fe в стабильных сталях. Значительно повысить функциональные свойства аустенитной стали, возможно, благодаря сочетанию термомеханической обработки и низкотемпературного ионного азотирования [1,2]. Данная работа направлена на исследование изменения структуры и фазового состава поверхностного слоя аустенитной стали 01Х17Н13М3, подвергнутой прокатке, после низкотемпературного ионного азотирования.

Материалы и методы исследования. В качестве объекта исследования была выбрана стабильная аустенитная сталь Fe-17Cr-13Ni-1,7Mn-2,7Mo-0,5Si-0,01C мас.% (01Х17Н13М3). Закаленные заготовки подвергали плоской прокатке при комнатной температуре до степени осадки 80%. Это обеспечило формирование в стали высоконеравновесной субмикрокристаллической (СМК) структуры со средним размером элементов 220±50 нм и высокой плотностью дислокаций 5×10^{14} м$^{-2}$ (рис. 1). Согласно рентгеноструктурному анализу после прокатки сталь имела аустенитную структуру, с параметром

решетки 0,36 нм. Низкотемпературное ионное азотирование образцов с СМК структурой проводили при температуре 540°С (12 ч.) и давлении рабочего газа Р=300 Па.

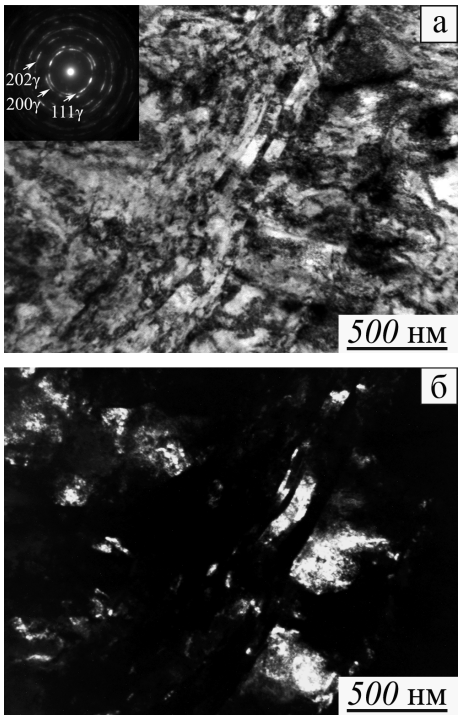


Рис. 1. Электронно-микроскопические светлопольное (а) и темнопольное (б) изображения структуры стали 01Х17Н13М3 после прокатки. Темнопольное изображение к (а) получено в рефлексе γ-Fe

Результаты и обсуждение. В результате ионного азотирования на поверхности стальных образцов формируется упрочненный азотированный поверхностный слой толщиной 22 −27 мкм и диффузионная зона шириной ≈40 мкм, для которой характерно твердорастворное упрочнение аустенита азотом. Рентгеноструктурный анализ и анализ микродифракционных картин, полученных методом ПЭМ, позволяет говорить о том, что фазовый состав поверхностных слоев образцов после азотирования представлен аустенитом (матрица), легированным азотом аустенитом, нитридами различного состава CrN, Cr_2N, FeN, $Fe_{(2,3)}N$, Fe_4N и небольшой долей феррита (только азотированный поверхностный слой).

На рисунке 2 представлены светлопольное изображение и соответствующая микродифракционная картина (с выделенной области), а также темнопольное изображение микроструктуры азотированного слоя аустенитной стали. Методом ПЭМ установлено, что азотированный слой имеет неоднородную структуру: на поверхности образцов формируется тонкая пленка наноразмерных оксикарбонитридов (0,2 мкм). Ниже пленки наблюдали подслой, толщиной ≈20−25 мкм, состоящий из дисперсных нитридов размером 20−30 нм, феррита и азотированного аустенита (рис. 2). Дисперсные нитриды формируют конгломераты, при этом, также наблюдаются протяженные области субмикронного размера пересыщенного азотом аустенита. Появление в стали ферритной фазы связано с образованием в приповерхностных слоях CrN и Cr_2N и обеднением по хрому твердого раствора после азотирования [1].

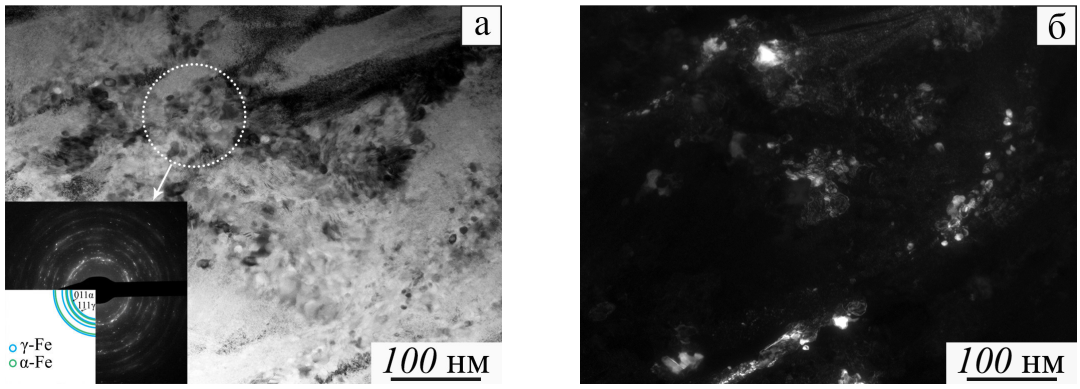


Рис.2. Микроструктура поверхностного азотированного слоя аустенитной стали (поперечное сечение образца): а – светлопольное изображение и дифракция (вклейка); б – темнопольное изображение к (а), полученное в совмещенном рефлексе нитридов и аустенита

При переходе к диффузионной зоне (шириной ≈40 мкм), с увеличением глубины, доля нитридов постепенно уменьшается, а основной фазой является легированный азотом аустенит, который содержит высокую плотность деформационных двойников. Формирование СМК состояния с высокой плотностью дефектов и границ зерен в образцах стали до азотирования способствовало частичной релаксации структуры в диффузионном слое при насыщении азотом (540°С) с дальнейшим образованием высокой плотности двойников деформации, как релаксационного механизма в структуре (рис.3).

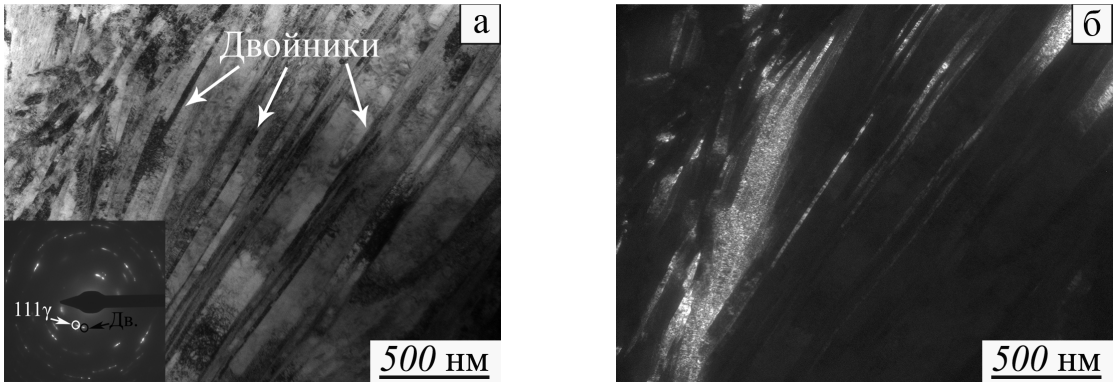


Рис. 3. Светлопольное электронно-микроскопическое изображение и соответствующая картина микродифракции (вклейка) диффузионной зоны азотированной стали 01Х17Н13М3;
б – темнопольное изображение к (а), полученное в рефлексе двойника

Микроструктура матрицы под композиционным азотированным слоем имеет близкую морфологию к исходной зеренно-субзеренной структуре субмикронного масштаба, полученную при прокатке и приведенную на рисунке 1.

Заключение. Ионное азотирование аустенитной стали с СМК структурой, сформированной холодной прокаткой, способствует формированию неоднородного композиционного слоя на поверхности образцов, состоящего из нескольких подслоев, а именно: (1) пленки из оксикарбонитридов, (2) азотированного слоя, содержащего протяженные области легированного азотом аустенита, феррит и дисперсные нитриды различного состава (CrN, Cr_2N, FeN, $Fe_{(2,3)}N$, Fe_4N), (3) диффузионной зоны с высокой плотностью двойников деформации и (4) аустенитной матрицы со структурой близкой к исходному состоянию, полученному при прокатке.

Авторы работы выражают благодарности д.т.н. Рамазанову К.Н. и профессору Будилову В.В. за помощь в проведении экспериментальных исследований.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Li Y., Wang L., Xu J., Zhang D. Plasma nitriding of AISI 316L austenitic stainless steels at anodic potential // Surface & Coatings Technology. – 2012. – № 206. – P. 2430–2437.
2. 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.
3. Горелик С.С., Скаков Ю.А., Расторгуев Л.Н. Рентгенографический и электронно-оптический анализ. – М: МИСиС, 1994. – 328 с.

РАДИАЦИОННО-ПРИВИВОЧНАЯ ПОЛИМЕРИЗАЦИЯ ПЛЕНОК ПОЛИВИНИЛИДЕНТФТОРИДА

М.А. Мысаханов

Научный руководитель: ассистент кафедры общей физики Н.А. Дуброва

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: mysahanov@gmail.com

RADIATION GRAFT POLIMERIZATION OF POLY(VINYLIDEN FLUORIDE) FILMS

M.A. Myssakhanov

Scientific Supervisor: assistant of department of general physics N.A. Dubrova

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

E-mail: mysahanov@gmail.com

Abstract. *By radiation-chemical grafting to the polymer matrix of styrene and sulfonation PVDF film obtained proton-exchange membrane for fuel cells. The influences of kinetics of accumulation of styrene in the polymer film, and the transport properties of the samples.*

Введение. Полимерная мембрана является наиболее важным компонентов ТЭ, которая виляет на выбор материалов для электродов, рабочий диапазон температур и т. д. В настоящее время коммерческие мембраны удовлетворяют всем требованиям, предъявляемые в процессе работы топливного элемента. Одной из лидирующих мембран на сегодняшний момент является мембрана Nafion, разработанная компанией DuPont. Однако процесс синтеза этих мембран является дорогостоящим из-за сложности синтеза [1]. В связи с этим возникает необходимость в поиске альтернативных аналогов полимерных мембран, которые подходят на роль протон-проводящей мембраны.

Альтернативным и относительно дешевым способом синтеза протонообменных мембран (ПОМ) для ТЭ является метод прививки ионногенных групп к полимерной матрице. Образцы получают на основе готовых коммерческих мембран в два этапа. На первом пленки облучают в растворе мономера, а после сульфируют [2].

Целью данной работы является синтез и исследование пленок поливинилиденфторида (ПВДФ) модифицированных радиационно-химическим методом, с последующим сульфированием пленок.

Экспериментальная часть. Образцы пленки поливинилиденфторида (ПВДФ) толщиной 20 мкм, помещались в контейнеры с прививочным раствором (стирол-толуол 2:1) для последующего облучения. Облучение пленок проводили на циклотроне Р-7М ионами гелия. Энергия пучка ионов составляла 27 МэВ, ток пучка – 0,01 мкА/см$^{-2}$. Время облучение варьировалось от 30 секунд до 2,5 минут.

После облучения образцы сульфировались в концентрированной серной кислоте при 95^{0}С в течении 70 часов.

Результаты. На рисунке 1 представлены данные по кинетике прививки стирола в пленке ПВДФ. Как видно, с увеличением флюенса происходит полимеризация стирола в матрице ПВДФ. При значениях флюенса 2 *10^{13}-2,5*10^{13} ион/см^2 возможно внедрить в пленку ПВДФ до 5-7 масс. % стирола.

На рисунке 2 представлены УФ – спектры пленок после облучения в растворе стирола. По литературным данным полоса поглощения стирола (C8H8) находиться в интервале длин волн 240 – 260 нм

[3], что хорошо согласуется с экспериментальными данными. И можно заметить, что при увеличении флюенса увеличивается интенсивность линии, по которым можно судить о количественном содержании стирола в пленке.

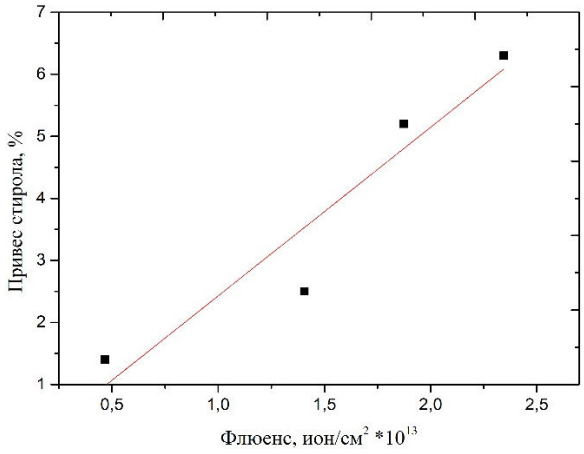


Рис.1. Кинетика накопления стирола в полимерной матрице ПВДФ

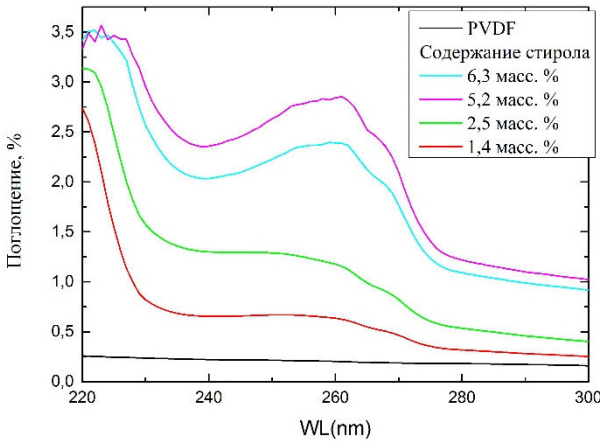


Рис. 2. УФ – спектры (поглощение) пленок после облучения в растворе стирола

В таблице 1 представлены значения протонной проводимости синтезированных мембран, сопоставленные со, степенью сульфирования, флюенсом и водопоглощением. Сульфирование привитого стирола к полимерной матрице придает пленкам ПВДФ гидрофильность и способность набухать в воде, что приводит к увеличению массы до 10%. Если сравнить значение обменной емкость с содержанием сульфо-групп в полимерной пленке, то можно увидеть, что при увеличении количества сульфо-групп в полимере происходит незначительное уменьшение значения обменной емкости, что можно объяснить постепенным увеличением части стирола не допустимой для сульфирования в условиях применяемой методики.

Таблица 1.

Значения флюенса, степени прививки стирола, сульфирования и протонной проводимости синтезированных пленок ПВДФ.

Флюенс, ион/см^2, 10^{13}	Сульфирование, %	Водопоглащение, %	Протонная проводимость, См/см * 10^{-5}
0,469	3,17	0,97	--
1,406	3,56	4,36	2,532
1,875	3,89	8	17,123
2,344	4,34	8,59	66,313

Если сравнить значение обменной емкость с содержанием сульфо-групп в полимерной пленке (рисунок 3), то можно увидеть, что при значении степени сульфирования 4% наблюдается незначительный спад обменной емкости, что можно объяснить увеличением части стирола не допустимой для сульфирования.

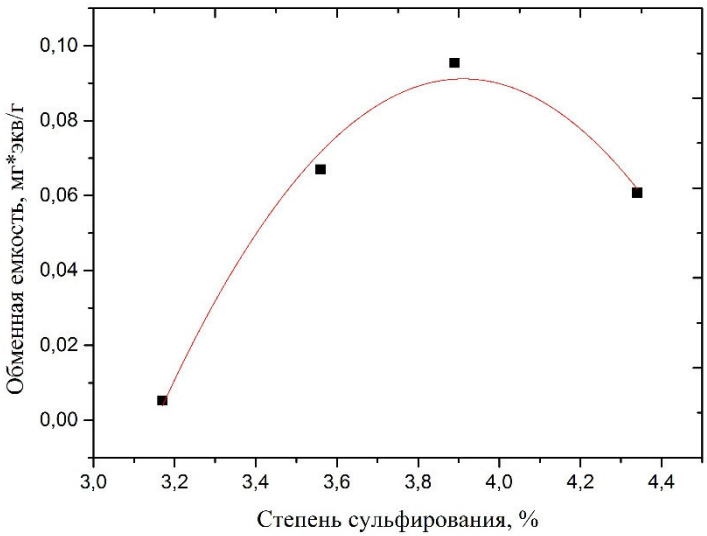


Рис. 3. Зависимость обменной емкости от степени сульфирования

Вывод. В результате проведенных исследовании была изучена кинетика накопления стирола в полимерной пленке. Установлено, что при значениях флюенса 2 $*10^{13}$-2,5$*10^{13}$ ион/см^2 возможно внедрить в пленку ПВДФ до 5-7 масс. % стирола. Показано, что водопоглащение синтезированных мембран заметно растет с увеличением степени сульфирования. Значения протонной проводимости синтезированных мембран составляет 1,2$*10^{-5}$-66,3$*10^{-5}$ См/см, что хорошо согласуется со значениями водопоглощения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Галлямов М.О. Топливные элементы с полимерной мембраной: Материалы к курсу по основам топливных элементов / М.О. Галлямов, А.Р. Хохлов. - М.: Физический факультет МГУ, 2014. - 72 с.
2. Dargaville T. R. et al. High energy radiation grafting of fluoropolymers //Progress in Polymer Science. – 2003. – Т. 28. – №. 9. – С. 1355-1376.
3. Гулиев К. Г. и др. Ультрафиолетовые спектры поглощения 2-замещенных-1-(п-винилфенил) циклопропанов //Журнал структурной химии. – 2009. – Т. 50. – №. 4. – С. 720-722.

ИЗМЕНЕНИЕ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ АЛЮМИНИЕВЫХ СПЛАВОВ ПРИ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ

А.А. Мякинин

Научный руководитель: PhD Б.К. Рахадилов

Восточно-Казахстанский государственный технический университет им. Д. Серикбаева,

Казахстан, г. Усть-Каменогорск, ул. Протозанова 69, 070004

E-mail.ru: rakhadilovb@mail.ru

CHANGING THE FINE STRUCTURE ALUMINUM ALLOYS UNDER INTENSIVE PLASTIC DEFORMATION

A.A. Myakinin

Scientific Supervisor: PhD B.K. Rakhadilov

East-Kazakhstan State Technical University D.Serikbaev, г. Ust-Kamenogorsk, st. Protozanova 69, 070004

E-mail.ru: rakhadilovb@mail.ru

Abstract. *This chapter shows the experimental data on the effect of different methods of plastic deformation on the evolution of structural and phase transformations in the AMC and AMG6 alloys.*

Введение. Одна из основных задач современного материаловедения заключается в получении высокопрочных материалов с повышенными прочностными и технологическими характеристиками. Решением такой задачи является эффективный способ придания металлам и сплавам субмикрокристаллической (СМК) и нанокристаллической (НК) структуры. [1-3]. Наиболее перспективным методом получения СМК и НК материалов из вышеперечисленных методов служит интенсивная пластическая деформация (ИПД) [1,2]. Не менее важным направлением научных исследований является также изучение ультрамелкозернистых алюминиевых сплавов. В связи с вышеизложенным, целью данной работы является исследование тонкой структуры алюминиевых сплавах при интенсивной пластической деформации.

Материалы и методы исследования. В соответствии с поставленной целью в качестве объекта исследования были выбраны алюминиевые сплавы АМЦ и АМГ6 широко применяемые в современной авиации, самолетостроении, судостроении, железнодорожном транспорте, автомобильном транспорте, строительстве, нефтяной и химической промышленности.

Структурные исследования проводили методами электронной дифракционной микроскопии на тонких фольгах на электронном микроскопе JEOL-2100 с использованием гониометрических приставок при ускоряющем напряжении 100 кВ. Рабочее увеличение в микроскопа выбиралось от 10000 крат.

Изображения тонкой структуры алюминия, полученные при просмотре в электронном микроскопе, были использованы, во-первых, для классификации морфологических признаков структуры, во-вторых, для определения размеров, объемных долей α- и γ-фаз, а также карбидных фаз и мест их локализации и, в-третьих, для определения параметров тонкой структуры материала.

Результаты исследований и их обсуждение. На рисунке 1 показана структура сплава АМЦ в исходном состояний. В исходном состоянии в сплаве АМЦ наблюдается высокая плотность хаотично

распределенных дислокаций с плотностью 5-10 $*10^{9}$ $см^{-2}$. В объеме зерен наблюдаются равномерно распределенные частицы второй фазы.

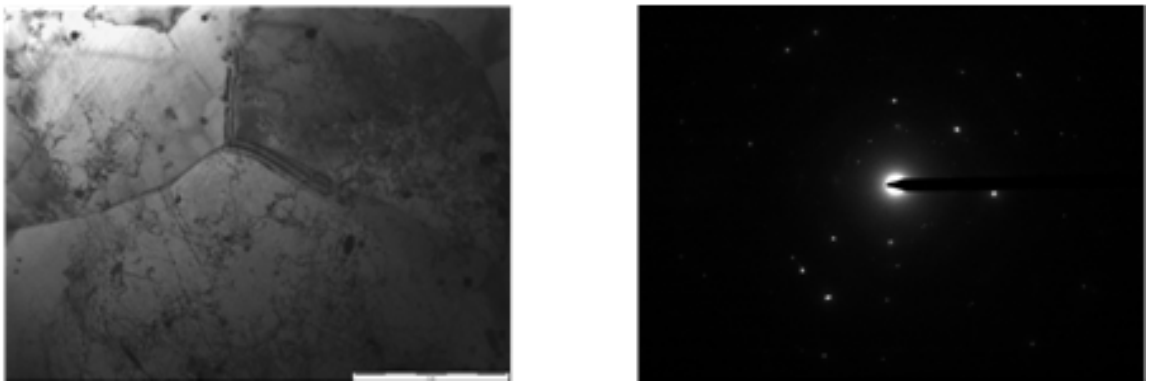


Рис. 1 - Светлопольное изображение структуры и микродифракция с участка сплава АМЦ

После РКУП наблюдается разбиение материала на мелкие разориентированные фрагменты в сплаве АМЦ (рисунок 2). На микродифракции обнаруживаются рефлексы от ГЦК фазы с параметром решетки, близким к параметру решетки алюминия. Отражения от вторых фаз отсутствуют. На изображении структуры частиц вторых фаз также не наблюдаются.

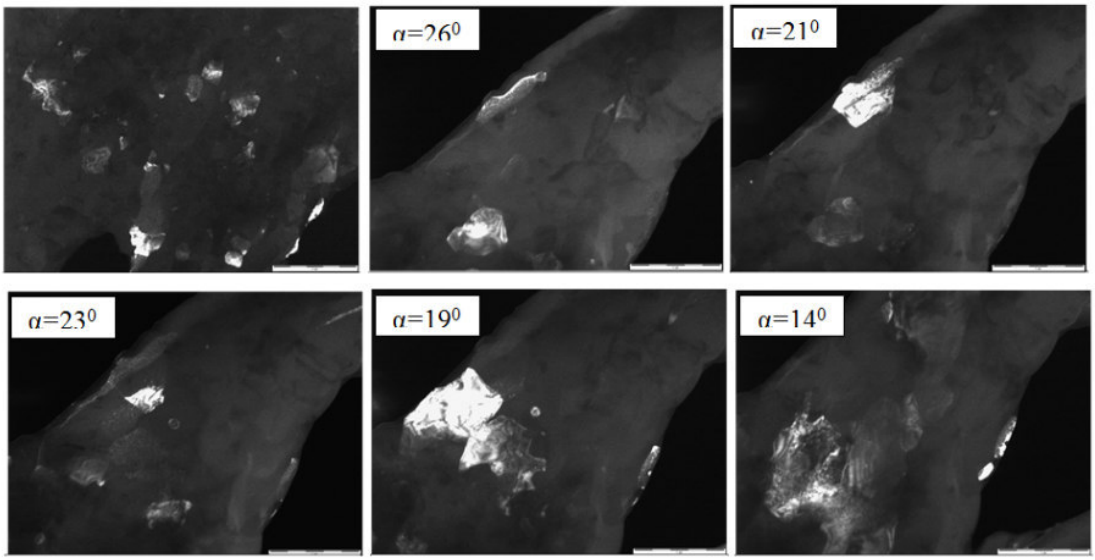


Рис. 2 - Темнопольные изображения структуры сплава АМЦ после РКУП в матричном рефлексе (α – показание гониометра)

Методом ПЭМ также исследовались тонкая структура деформируемого алюминиевого сплава системы Al-Mg-Mn – сплав АМГ6.

На рисунке 3 показаны светлопольные изображения тонкой структуры сплава АМГ6 и его микродифракция. В исходном состоянии в сплаве АМГ6 наблюдается высокая плотность хаотично распределенных дислокаций с плотностью 2-6 $*10^{10}$ $см^{-2}$. В объеме зерен наблюдаются равномерно распределенные частицы второй фазы.

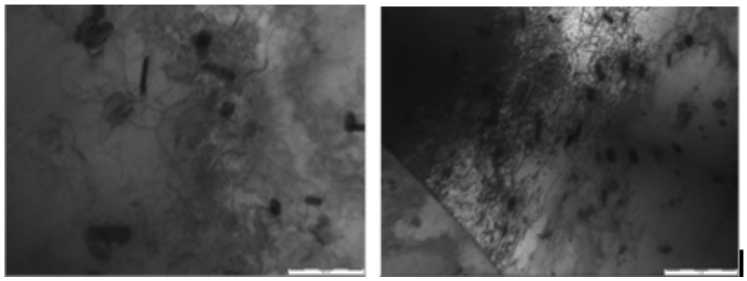


Рис. 3 - Светлопольные изображения структуры сплава АМГ6, микродифракция с участка образца

После РКУП наблюдается разбиение материала на мелкие разориентированные фрагменты. На микродифракции обнаруживаются рефлексы от ГЦК фазы с параметром решетки, близким к параметру решетки алюминия. Присутствуют отдельные рефлексы от вторых фаз, однако, на изображении структуры частиц вторых фаз практически не наблюдаются. Дислокационная структура изменяется: формируются дислокационные сетки (указаны стрелками на рисунке 4), внутри фрагментов дислокации практически не наблюдаются.

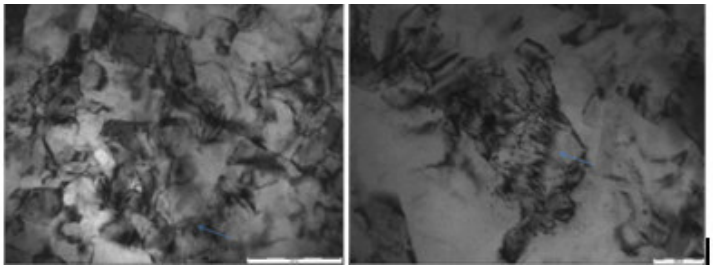


Рис. 4- Светлопольное изображение структуры сплава АМГ6 и микродифракция с участка образца сплава АМГ6 с параметрами Al и отдельные рефлексы от вторых фаз (указаны стрелками)

Заключение. Таким образом, было исследовано изменение тонкой структуры алюминиевых сплавах при интенсивной пластической деформации, которое показало что после РКУП наблюдается разбиение материала на мелкие разориентированные фрагменты. На микродифракциях обнаруживаются рефлексы от ГЦК фазы с параметром решетки, близким к параметру решетки алюминия. Обнаружены отдельные рефлексы от вторых фаз, однако, на изображениях структуры частиц вторых фаз не наблюдались.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Валиев Р.З., Александров И.В. Объемные наноструктурные металлические материалы: получение, структура и свойства. М.: ИКЦ «Академкнига», 2007. -398 с.
2. Tereshchenko N.A., Yakovleva I.L., Zubkova T.A., Chukin M.V., and Koptseva N.V. Structure Levels of Pearlite Deformation in Carbon Steel of Eutectoid Composition // The Physics of Metals and Metallography.-2013. -Vol.114, №5. -P.430-439.
3. Raabe D., Kumar R. Tensile deformation characteristics of bulk ultrafine-grained austenitic stainless steel produced by thermal cycling // Scripta Materialia. -2012. -№66. -P.634-637.

ЗАКОНОМЕРНОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ ФРАГМЕНТИРОВАННОЙ СТРУКТУРЫ В МОНОКРИСТАЛЛАХ ГЦК 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

THE RULES OF FORMATION FRAGMENTED STRUCTURE IN SINGLE CRYSTALS OF FCC ALLOY

E.N. Nikolenko, T.S. Kunitsyna
Scientific Supervisor: Prof., Dr. L.A. Teplyakova
Tomsk State University of Architecture and Building, Russia, Tomsk, Solyanya sq., 2. 634003
E-mail: kma11061990@ mail.ru

***Abstract**. The paper presents the results of crystallogeometric analysis of the deformation relief in faces of a Ni_3Fe single crystal under compression. The examined single crystal was a right-angle prism. The rules of localization of shear deformation were determined.*

Деформация монокристаллов металлов и сплавов с ГЦК решеткой сопровождается их разбиением на области с различной организацией сдвиговой деформации, получившие в литературе название макрофрагментов сдвига [1-4]. Макрофрагменты, как правило, имеют форму пластин, параллельных соответствующим плоскостям скольжения. Подобную организацию сдвига часто называют макрополосами скольжения. Макропачки следов скольжения, наблюдающиеся на поверхности кристалла образовались в процессе деформации, локализованной в макрополосах скольжения. А каждый след скольжения, в свою очередь, образовался в результате деформации, локализованной в мезополосе скольжения.

Настоящая работа посвящена исследованию закономерностей фрагментации сдвиговой деформации, реализующейся при сжатии [001]-монокристалла сплава Ni_3Fe в состоянии с ближним атомным порядком на макроуровне.

Исследованный монокристалл имел форму прямой призмы с основанием в виде трапеции. Съемка деформационного рельефа проводилось на оптическом микроскопе МИМ-10 с 250 кратным увеличением. В каждой макропачке следов (МПС) проводились измерения координаты X следов скольжения вдоль реперов, перпендикулярных следам данной макропачки. По этим данным были определены расстояния между соседними следами скольжения в макропачках (ΔX) и ширина следа ($d_{сл}$). Поскольку каждый след скольжения образуется в результате деформации, локализованной в мезополосе скольжения, то расстояния (s) между мезополосами скольжения и их толщины (d) определялись по формулам: $s = \Delta X \sin\alpha$; $d = d_{сл} \cdot \sin\alpha$, где α- угол между поверхностью грани и плоскостью скольжения. По полученным массивам данных строились гистограммы s и d, а также диаграммы ΔX-X.

Параметры картины следов скольжения.

В работе [4] было установлено, что при ε = 0,05 на всех боковых гранях монокристалла обнаруживается 14 макропачек следов скольжения, образованных скольжением в соответствующих макрополосах сдвига. Они различаются семейством плоскостей, скольжением по которым были образованы в ходе пластической деформации, местоположением на гранях, числом следов скольжения, шириной и длиной. Как отмечалось, макропачки следов скольжения образуются на поверхности деформированного кристалла в результате сдвига по семейству параллельных плоскостей, локализованных в макрополосах скольжения. При ε = 0,05 в исследованном монокристалле всего было образовано пять макрополос скольжения: две крупные и три мелкие. В настоящей работе количественные характеристики (d, s, ΔX, h) следов скольжения были измерены для всех 14 МПС. Построены диаграммы ΔX-X, их распределения и определены моменты этих распределений.

На рис.1 приведены диаграммы ΔX-X для макропачек следов скольжения на грани (110). Видно, что макропачки имеют различную плотность следов скольжения. Особенно высока плотность следов в $МПС_1$. Причем, наиболее плотно в $МПС_1$ следы расположены в интервале координат 0,1 – 0,6 мм. Этот интервал пространственно совпадает с сечением объема облегченного сдвига для семейства плоскостей (111) гранью (110) [6]. Можно полагать, что в этой части $МПС_1$ достигнута плотность следов, близкая к предельной (0,2 $мкм^{-1}$). Из диаграмм также можно сделать вывод о том, что в направлении, перпендикулярном следам во всех макропачках плотность следов изменяется периодически, а именно, чередуются интервалы с высокой и низкой плотностью следов. Это означает, что в каждой макропачке следы также сгруппированы в пачки,

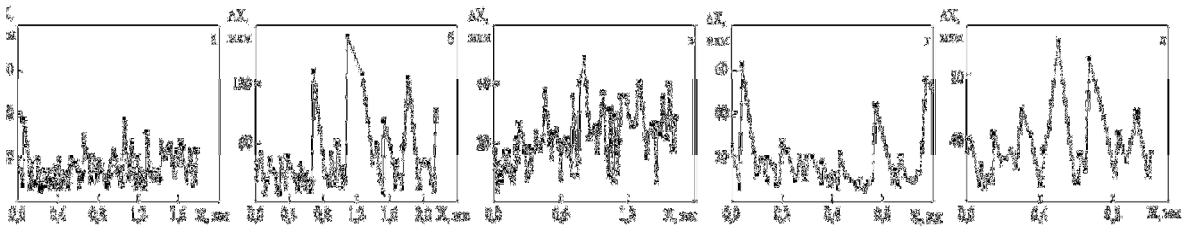


Рис.1 Диаграммы ΔX-X для макропачек, наблюдающихся на грани (110) монокристалла (а-$МПС_1$, б-$МПС_2$, в-$МПС_3$, г-$МПС_4$, д-$МПС_5$)

которые параллельны друг другу (в отличие от макропачек). Ширина этих пачек, число следов в них и расстояния между ними варьируют для разных МПС. Например, в $МПС_1$ наиболее вероятное расстояние между следами скольжения в пачках составляет примерно 5 мкм, в то время как расстояние между самими пачками примерно в 4 раза больше. Поскольку каждый след скольжения, наблюдающийся на поверхности кристалла, образуется в результате деформации, локализованной в мезополосе скольжения. По полученным массивам данных для всех макрополос скольжения, наблюдающихся на грани (110), были построены распределения расстояний (*s*) между такими мезополосами. Гистограммы s представлены на рис.2. Хотя в деталях распределения s для разных макрополос несколько отличаются друг от друга (в основном длиной хвоста распределения), в общем, все они близки к логарифмически нормальному виду. Определенные из гистограмм величины средних значений <s> в разных макрополосах можут различаться в 2-3 раза. В работе были построены гистограммы толщины (d) мезополос сдвига на грани (110) для всех макрополос. Все гистограммы подобны друг другу. Они имеют четко выраженный максимум, приходящийся на интервал 2 - 6 мкм. Естественно, что близкими оказались и средние значения <d>. Зная среднюю толщину мезополосы сдвига и среднее

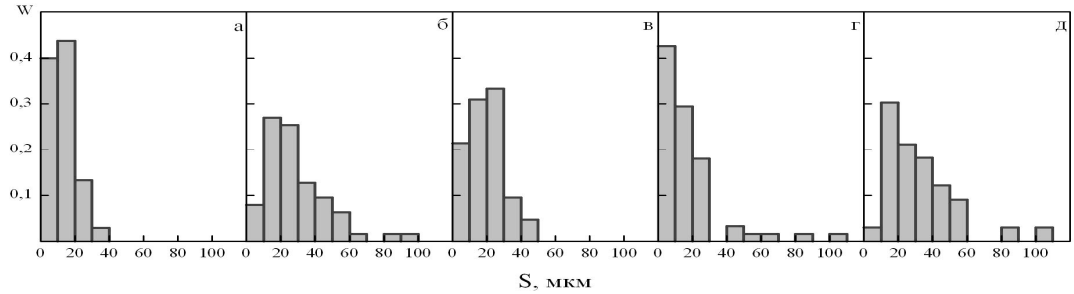


Рис. 2 Распределения расстояний (s) между мезополосами в макрополосах, формирующихся в монокристалле (а-МПС$_1$, б-МПС$_2$, в-МПС$_3$, г-МПС$_4$, д-МПС$_5$)

расстояние между мезополосами, можно оценить относительную долю объема макрополосы, в котором был локализован сдвиг. Результаты оценки показали, что эта величина, естественно, различается для разных макрополос сдвига, но не превышает 40%.

Заключение

Анализ диаграмм ΔX-X показал, что в направлении, перпендикулярном следам скольжения во всех макропачках плотность следов изменяется периодически, а именно, чередуются интервалы с высокой и низкой плотностью следов. Поскольку след скольжения на макроуровне образуется сдвигом в мезополосе, то это означает, что в каждой макрополосе мезополосы скольжения сгруппированы в пачки, которые параллельны друг другу (в отличие от макрополос). Пачка состоит из 3-8 мезополос сдвига.

Распределения расстояний (*s*) между мезополосами в каждой макрополосе скольжения показали, что наиболее вероятное расстояние между мезополосами в пачках составляет примерно 5 мкм, в то время как расстояние между самими пачками примерно в 4 раза больше. Мезополосы в обеих крупных макрополосах располагаются примерно на одинаковых расстояниях. В остальных макрополосах эти расстояния значительно больше.

Из гистограмм толщины (d) мезополос скольжения определено наиболее вероятное значение величины d, которое в каждой макрополосе принимает значения в интервале 2 - 6 мкм. Подобная локализация деформации в мезополосах сдвига связана, по–видимому, с разрушением ближнего атомного порядка в плоскости скольжения, в результате чего скольжение в ближайших к ней плоскостях становится предпочтительнее.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Теплякова Л.А., Куницина Т.С., Конева Н.А., Старенченко В.А., Козлов *Э.В.* Макрофрагментация сдвига в монокристаллах сплава Ni_3Fe при активной пластической деформации //Физ. мезомех., - 2000, - Т. 3, - № 5, - С. 77-82.
2. Хоникомб Р. Пластическая деформация металлов. – М.: Мир, 1974.-408с.
3. Neuhauser H. Slip line formation and collective dislocation motion // Dislocation in Solids, - 1983, - V.8. - P. 319-440.
4. Теплякова Л.А., Куницына Т.С., Тихонова О.А., Семин В.О., Старенченко В.А. Фрагментация сдвиговой деформации на макроуровне в “призматическом” [001]-монокристалле сплава Ni_3Fe //Физ. мезомех., - 2010, - Т.13. - №4. - С.109-114.

ВЛИЯНИЕ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА СТРУКТУРНО-ФАЗОВОЕ СОСТОЯНИЕ СТАЛИ СО СТРУКТУРОЙ ОТПУЩЕННОГО МАРТЕНСИТА

А.В. Никоненко[1], Н.А. Попова[2], Е.Л. Никоненко[2], Н.А. Конева[2]

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. Н.А. Конева[2]

[1]Национальный исследовательский Томский государственный университет,

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

[2]Томский государственный архитектурно-строительный университет,

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

E-mail: aliska-nik@mail.ru

STRUCTURE AND PHASE COMPOSITION OF TEMPERED MARTENSITE STEEL AFFECTED BY SEVERE PLASTIC DEFORMATION

A.V. Nikonenko[1], N.A. Popova[2], E.L. Nikonenko[2], N.A. Koneva[2]

Scientific Supervisor: Prof. Dr. N.A. Koneva[2]

[1]Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050

[2]Tomsk State University of Architecture and Building, Russia, Tomsk, Solyanaya sq., 2, 634003

E-mail: aliska-nik@mail.ru

Abstract. *The paper presents the transmission electron microscopy investigations of the structure and phase composition of the type 0,6C-1Mo-1V-1Nb tempered martensite steel modified by the equal channel angular pressing. It is shown that ECAP affects the morphology and phase composition of the steel. Investigations covered the defect structure, dislocation density and internal stresses.*

Введение. Низкоуглеродистые стали являются основным классом конструкционных материалов. Однако в исходном крупнокристаллическом состоянии они имеют низкие прочностные характеристики. Поэтому формирование в этих сталях структур, обеспечивающих высокий комплекс механических свойств, имеет важное фундаментальное и прикладное значение. Повышение механических характеристик путем применения различных видов термической обработки подробно изучено. В последнее время все больше внимания уделяется получению ультрамелкозернистых и нанокристаллических состояний методом интенсивной пластической деформации (ИПД), что позволит значительно расширить область применения сталей благодаря достижению повышенных прочностных свойств. Несмотря на значительные успехи в исследовании процессов измельчения зерна и эволюции структуры различных пластичных материалов при ИПД, комплексное действие механизмов упрочнения сталей после ИПД изучено недостаточно.

Целью настоящей работы являлось исследование структурно-фазового состояния конструкционной стали 06МФБ со структурой отпущенного мартенсита после равноканального углового прессования (РКУП).

Материал и методы исследования. Материалом исследования служила низкоуглеродистая сталь 06МФБ (0,06 % C; ~1 % Mo; ~1 % Nb; ~1 % V) с исходной структурой отпущенного мартенсита. Сталь деформировалась методом РКУП. При РКУП образцы подвергались сдвиговой деформации путём

сжатия по двум пересекающимся под углом Ф = 120^0 каналам равного диаметра при температуре 400^0С без промежуточных отжигов. Число проходов соответствовало N = 6. Эквивалентная деформация, реализуемая в результате РКУП, ε = 4.

Исследования проведены методом просвечивающей дифракционной электронной микроскопии (ПЭМ) с использованием электронного микроскопа ЭМ-125 при ускоряющем напряжении 125 кВ. Рабочее увеличение в колонне электронного микроскопа составляло 25000 крат. Изучение структуры и фазового состава стали проводилось на фольгах.

Полученные результаты. Структура матрицы стали в исходном состоянии представлена двумя морфологическими составляющими: 1) отпущенный мартенсит (рис.1*а*) и 2) зерна α-фазы, не унаследовавшие структуру мартенситного превращения (рис.1*б*). Размеры α-зерен ~5 мкм. Объемная доля первой морфологической составляющей ~0,6, второй – ~0,4.

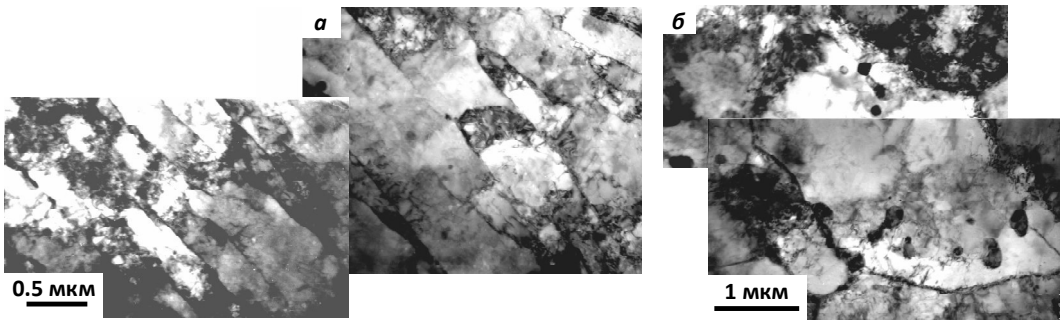


Рис.1. Электронно-микроскопическое изображение тонкой структуры стали 06МФБ в исходном состоянии: а – пакетный мартенсит, б – α-зерно

В обоих морфологических составляющих присутствует карбидная фаза. Согласно дифракционному анализу, в стали присутствует только одна модификация карбида – карбид $(V,Mo,Nb)_2C$, обладающий орторомбической кристаллической решеткой. Установлено, что карбидная фаза в α-зернах присутствует как внутри, так и по границам зерен, в пакетном мартенсите – только по границам мартенситных реек. Все частицы, независимо от мест расположения, обладают округлой формой. В области зерен α-фазы средний размер карбидных частиц составляет ~100 нм, их объемная доля – 2,5%. В структуре отпущенного мартенсита размер частиц меньше (~30 нм), объемная доля их также меньше (0.5%).

Скалярная плотность дислокаций в структуре пакетного мартенсита составляет величину $5{,}6\cdot10^{14}$ м$^{-2}$, в зернах α-фазы – $1{,}5\cdot10^{14}$ м$^{-2}$. И в мартенситных рейках, и в α-зернах присутствует избыточная плотность дислокаций, что сопровождается возникновением локальных полей напряжений. Их наличие проявляется в присутствии изгибных экстинкционных контуров. Избыточная плотность дислокаций в мартенситных рейках составляет величину $3{,}9\cdot10^{14}$ м$^{-2}$, в α-зернах и – $1{,}5\cdot10^{14}$ м$^{-2}$. Сопоставление скалярной и избыточной плотностей дислокаций показывает, что в исходном состоянии стали дислокационная структура сильно поляризована. Поляризация дислокационной структуры привела к локальным внутренним (дальнодействующим) напряжениям: в мартенситных рейках их величин 390 МПа, в α-зернах – 410 МПа. Несмотря на то, что значение скалярной плотности дислокаций меньше

в α-зернах, локальные поля в них сравнимы с локальными полями в пакетном мартенсите. Это объясняется более высокой поляризованностью дислокационной структуры в α-зернах.

Деформация методом РКУП привела к значительным изменениям матрицы стали. Структура пакетного мартенсита сохранила свои главные черты – параллельность границ мартенситных реек. Однако теперь она значительно фрагментирована (рис.2*а*). Средний размер фрагментов 0,3 × 0,8 мкм. Со структурой α-зерен произошли также большие изменения: внутри зерен α-фазы сформировалась структура с непрерывными и дискретными разориентировками (рис.2*б*), размер зерен уменьшился почти на порядок (0,6 мкм).

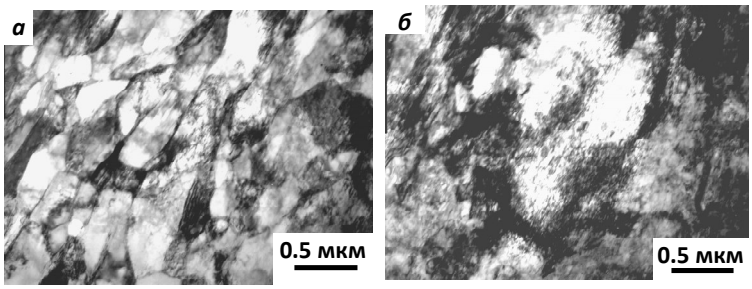


Рис.2. Электронно-микроскопическое изображение структуры стали 06МФБ после РКУП: а – пакетный мартенсит, б – α-зерна

Как и в исходном состоянии, в обоих морфологических составляющих присутствует карбидная фаза – карбид $(V,Mo,Nb)_2C$. Однако теперь карбидные частицы присутствуют как внутри (на дислокациях), так и на границах обеих морфологических составляющих матрицы стали. На дислокациях частицы обладают округлой формой. Их средний размер в пакетном мартенсите составляет 10 нм, в α-зернах частицы крупнее (30 нм), но в 4 раза меньше, чем в исходном состоянии. Объемная доля частиц в пакетном мартенсите составляет 0,2%, в α-зернах – 0,1%. Таким образом, РКУП привело к образованию карбидов в пакетной составляющей матрицы стали и к измельчению и растворению карбидов, находящихся внутри зерен α-фазы.

Под действием РКУП изменились не только размеры карбидных частиц, расположенных на границах морфологических составляющих, но и их форма. Теперь частицы имеют пластинчатую форму: на границах реек они более тонкие и вытянутые (20 × 120 нм), на границах зерен α-фазы их средний размер 40 × 80 нм. Однако объемная доля карбидов в пакетном мартенсите по сравнению с исходным состоянием не изменилась (0,5%), в зернах α-фазы – несколько уменьшилась (1%).

Деформация методом РКУП привела к незначительному уменьшению величины скалярной плотности дислокаций в реечной структуре и резкому увеличению в α-зернах. Дислокационная структура во всем материале полностью поляризована. Локальные внутренние напряжения в реечной структуре превышают 1000 МПа, в α-зернах они достигают 900 МПа.

Заключение. Проведенные методом ПЭМ исследования показали, что РКУП стали 06МФБ ведет, во-первых, к измельчению фрагментированной и зеренной структуры. Во-вторых, не изменяет типа карбидной фазы, но приводит к разрушению и частичному растворению карбидных частиц.

Работа выполнена при поддержке государственного задания на проведение научных исследований по проекту №3.8320.2017/БЧ

ИЗУЧЕНИЕ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В НАНОСТРУКТУРНЫХ ПОКРЫТИЯХ НА ОСНОВЕ Zr-Y-O

А.В. Никоненко[1], М.П. Калашников[2,3], В.В. Нейфельд[2], М.В. Федорищева[2,3]

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

TEM INVESTIGATION OF PHASE TRANSFORMATIONS OF NANOSTRUCTURED COATINGS ON THE BASIS OF Zr-Y-O

A.V. Nikonenko[1], M.P. Kalashnikov[2,3], V.V. Neyfeld [2], M.V. Fedorischeva[2,3]

Scientific Supervisor: Ass. Prof., Dr. M.V. Fedorischeva

[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. *The deposition of the multilayer nanostructuring coatings on the basis of Zr-Y-O are formed by pulse magnetron method. Structure-phase state of nanostructuring coatings was investigated by X-ray and TEM. It was established, that there are the ZrO_2 phases in tetragonal and monoclinic modifications in layers on the basis of Zr-Y-O system.*

Введение. Керамические материалы на основе стабилизированного иттрием диоксида циркония обладают уникальными физическими и механическими свойствами, имеет высокие прочностные показатели, трещиностойкость при сохранении устойчивости к коррозии и износу. Высокие значения коэффициента термического расширения благоприятствует сочленения деталей из диоксида циркония с металлическими и стальными деталями, имеющими близкие значения КТР. Помимо этого, такие материалы занимают лидирующие позиции среди огнеупорных конструкционных материалов, благодаря тому, что сохраняют высокие механические свойства до температур (0.8 – 0.9) $T_{пл}$, равной 3173 К. Поэтому покрытия на основе диоксида циркония используются как теплозащитные покрытия в горячих газовых секциях турбин [1].

Диоксид циркония имеет три устойчивых кристаллических структуры: моноклинная (М) от температуры 1170ºС, тетрагональная (Т) от температуры 1170ºС - 2370ºС и кубическая (С) от температуры 2370ºС [2-3].

Особое внимание исследователей обращено на обратимые мартенситные превращения в металлических сплавах (так называемые трансформационные превращения). Такие сплавы относятся к группе так называемых "умных" (smart) функциональных материалов, так как позволяют управлять своим поведением [2-3]. 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. Реализующийся эффект упрочнения позволяет достигать в керамических материалах прочностных характеристик (трещиностойкости, прочности), сопоставимых с конструкционными материалами.

Методы и Материалы. Целью работы является изучение структурно-фазового состояния многослойных покрытий на основе диоксида циркония, полученных методом импульсного магнетронного распыления.

Осаждение многослойных покрытий на основе чередующихся слоев Si-Al-N и Zr-Y-O проводили на вакуумной установке УВН-02МИ «КВАНТ», оснащенной двумя магнетронами с цирконий-иттриевой и кремний-алюминиевой мишенями и вакуумно-дуговым ионным источником с титановым катодом по методу, описанному в. Образец помещался в камеру на вращающийся стол, с помощью которого можно переводить его без развакуумирования в положение напротив любого из двух магнетронов или напротив ионного источника. Температура подложек при осаждении покрытий была 623К.

Методами рентгеноструктурного анализа (РСА) и электронной микроскопии исследовали тонкую структуру и фазовый состав многослойных покрытий. Для расшифровки рентгенограмм использовали банк данных JCPDS. Элементный состав и морфологию поверхности покрытий определяли с помощью энергодисперсионного рентгеновского микроанализатора (EDX) INCA-Energy (Oxford Instruments), встроенного в просвечивающий микроскоп JEOL-2100 и сканирующего электронного микроскопа LEO EVO-50XVP.

На рис. 1 представлены рентгенограммы двуслойного (Zr-Y-O/Si-Al-N) и однослойного (Zr-Y-O) покрытий с толщиной каждого слоя покрытия 3 мкм. В дальнейшем, двуслойное покрытие будем называть покрытием, полученным в условиях стесненного объема, однослойное покрытие покрытием, полученным в условиях свободного объема.

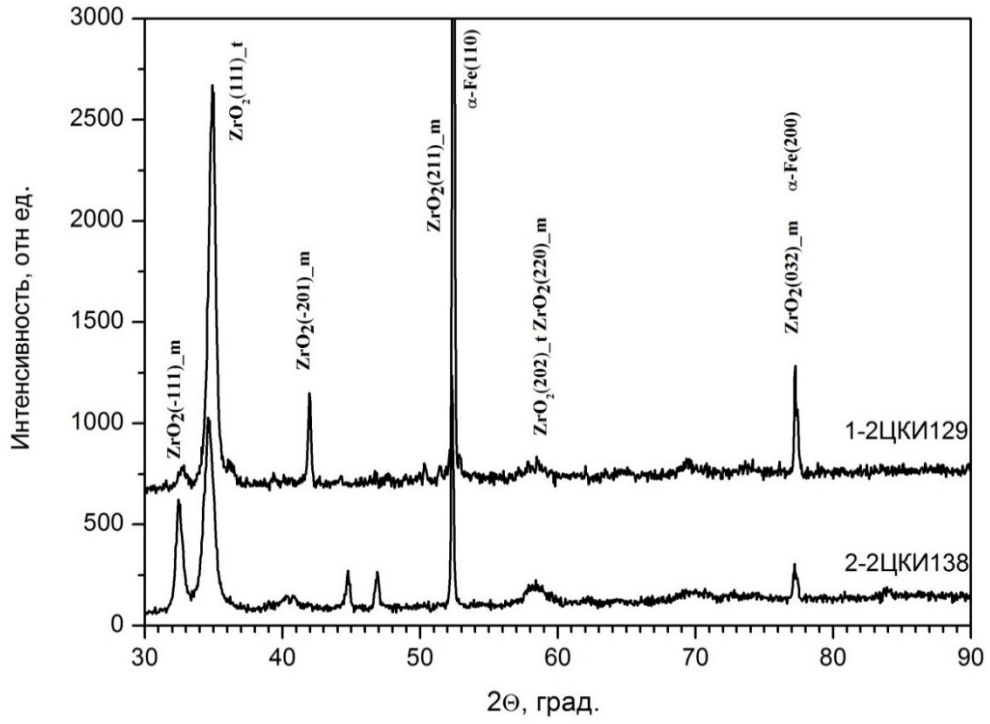
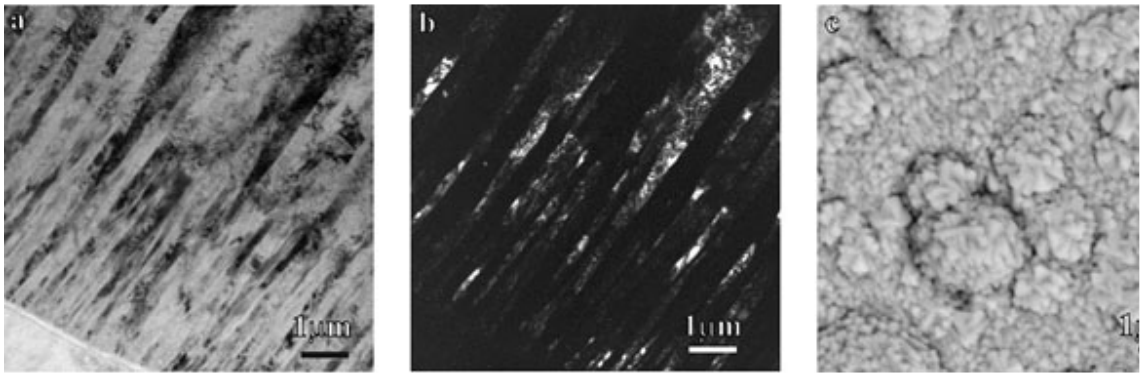


Рис.1. Рентгенограммы покрытия на основе Zr-Y-O: 1- в условиях свободного объема, 2- в условиях стесненного объема.

Видно, что оба покрытия в своем составе имеют фазу ZrO_2 в моноклинной и тетрагональной модификации. Интересно отметить, что покрытие, полученное в условиях свободного объема, имеет значительно меньше моноклинной фазы. По всей видимости, нанесение второго слоя на основе Si-Al-N предполагает дополнительную деформацию во время осаждения и формирования слоя покрытия, которая и приводит к мартенситным фазовым переходам и, соответственно, увеличению количества моноклинной фазы.

На рентгенограмме видно, что материал покрытия на основе ZrO_2 имеет ярко выраженную текстуру, что характерно для столбчатой структуры типичной для этого типа покрытий.

На рис.2 представлено электронно-микроскопическое изображение столбчатой структуры покрытия на основе ZrO_2 в условиях свободного объема. На рис.2, в показана морфология поверхности для этого покрытия. Видны поперечные сечения столбцов, выходящих на поверхность. Интересно отметить, что такая структура характерна как для образцов, полученных в условиях стесненного объема, так и для образцов, в условиях свободного объема.



а б в

Рис.2. Электронно-микроскопическое изображение поперечного сечения покрытия на основе Zr-Y-O, в условиях свободного объема: а-светлопольное изображение, б-темнопольное изображение, в-морфология поверхности покрытия.

Результаты и обсуждения

1. Методом рентгеноструктурного анализа установлено, что слои на основе Zr-Y-O имеют в своем составе кристаллическую фазу ZrO_2 в двух модификациях: тетрагональной и моноклинной. Фаза ZrO_2 состоит из столбчатых зерен со средним поперечным размером до 80 нм.
2. Количество моноклинной и тетрагональной фаз в условиях свободного и стесненного объемов существенно отличается.

Работа выполнена в рамках основной научной программы исследований академии наук за 2013-2020 годы и при финансовой поддержке РФФИ № 16-48-700198.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Каблов Е.Н., Мубояджян С.А. Жаростойкие и теплозащитные покрытия для лопаток турбины высокого давления перспективных ГТВ // Авиационные материалы и технологии. -2012. № S. С. 60-70.
2. Ciao Y.H. and Chen I - Wei. Martensitic growth in ZrO_2-AN in situ, small particle, TEM study of a single-interface transformation// Acta metal. mater.- 1990.-Vol. 38. - No. 6. - P. 1163-1174.
3. Hannink R. H. J., Kelly P.M., Muddle B. C. Transformation toughening in zirconia-containing ceramics // J. Am. Ceram. Soc.- 2000. -V. 83. -P. 461-487.

ВЛИЯНИЕ СПОСОБА СВАРКИ НА СТРУКТУРУ И ФАЗОВЫЙ СОСТАВ ЗОНЫ ТЕРМИЧЕСКОГО ВЛИЯНИЯ СВАРНОГО ШВА СТАЛИ 09Г2С

Е.А. Ожиганов[1], Н.А. Попова[2], Е.Л. Никоненко[2,3], А.Н. Смирнов[1,4]

Научный руководитель: профессор, д.т.н. А.Н. Смирнов[1,4]

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

[2]Томский государственный архитектурно-строительный университет,

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

[3]Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

[4]Кузбасский государственный технический университет, Россия, г. Кемерово, ул. Весенняя, 28, 650000

E-mail: zhigan84@mail.ru

STRUCTURE AND PHASE COMPOSITION OF WELDED JOINT IN 0,09C-2Mn-1Si-Fe STEEL DEPENDING ON WELDING PROCESS

E.A. Ozhiganov[1], N.A. Popova[2], E.L. Nikonenko[2,3], A.N. Smirnov[1,4]

Scientific Supervisor: Prof., Dr. A.N. Smirnov[1,4]

[1]LLC “Kuzbass Center of Welding and Control”, Russia, Kemerovo, Lenin Str., 33/2, 650055

[2]Tomsk State University of Architecture and Building, Russia, Tomsk, Solyanaya Sq., 2, 634003

[3]National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia, Lenin ave., 3, 0634050

[4]Kuzbass State Technical University, Russia, Kemerovo, Vesennyaya Str., 28, 650000

E-mail: zhigan84@mail.ru

Abstract. *The paper presents the transmission electron microscopy investigations of the structure and phase composition of welded joint formed by four types of welding process, namely: electrode welding with and without the introduction of artificial flaws and electropercussive welding also with and without the introduction of artificial flaws. Artificial flaws are pieces of aluminum. TEM investigations allow studying the structure and phase composition within the heat-affected zone at 1 mm distance from base material. Welded material is the type 0,09C-2Mn-1Si-Fe steel. It is shown that the type of welding affects the material morphology, phase composition, defect structure and its parameters.*

Введение. Современная технология испытывает множество различных способов сварки. Любой применяемый способ сварки имеет свои достоинства и недостатки. Известно, что структурно-фазовое состояние металла, формирующееся в процессе сварки, влияет на физико-механические характеристики изделий. Поэтому до сих пор остаются актуальными задачи увеличения качества сварных соединений и их надежности. Это, прежде всего, касается стыков наплавленного и основного металла, т.е. зоны термического влияния. Именно такие места являются наиболее опасными концентраторами напряжений, которые приводят к образованию трещин и различных дефектов.

Цель настоящей работы – исследование структурно-фазового состояния зоны термического влияния сварного шва (зоны вблизи стыка наплавленного и основного металлов) в зависимости от вида сварки.

Материал и методы исследования. Материалом исследования являлось сварное соединение, образованное четырьмя методами сварки: 1) ручной дуговой сваркой (РДС) без искусственных дефектов; 2) РДС с введением искусственных дефектов; 3) импульсной сваркой без искусственных дефектов и 4) импульсной сваркой с введением искусственных дефектов. Искусственные дефекты – кусочки алюминия. Свариваемый (основной) металл – сталь 09Г2С.

Исследования выполнялись в зоне термического влияния на расстоянии 1 мм от стыка наплавленного и основного металлов в сторону основного металла. Изучение структуры и фазового состава проводилось методом просвечивающей дифракционной электронной микроскопии на тонких фольгах на электронном микроскопе ЭМ-125 при ускоряющем напряжении 125 кВ. Рабочее увеличение в колонне микроскопа составляло 25000 крат.

Результаты исследования. Проведенные исследования показали, что матрица свариваемого металла после сварки любым из исследованных в работе методом представляет собой α-фазу – твердый раствор углерода и легирующих элементов в α-Fe с ОЦК кристаллической решеткой. Морфологическими составляющими в зависимости от вида сварки являются пластинчатый перлит и феррит. Типичные электронно-микроскопические изображения тонкой структуры металла, сформированные разными методами сварки, приведены на рис.1.

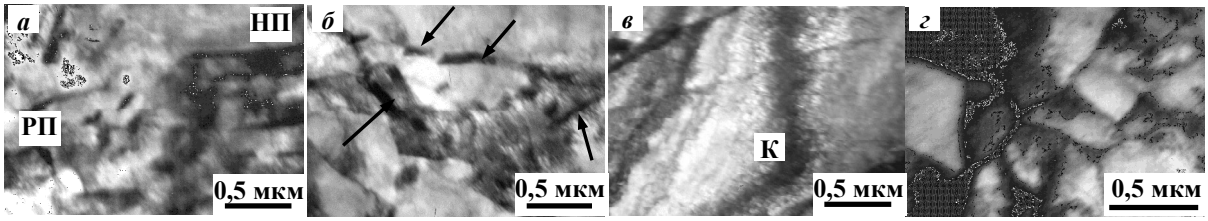


Рис.1. Электронно-микроскопическое изображение тонкой структуры основного металла сварного шва на расстоянии 1 мм от границы сплавления: а – перлит (НП – неразрушенный, РП – разрушенный), б – частицы цементита (отмечены стрелками) по границам зерен разрушенного перлита, в – нефрагментированный феррит (К – изгибный экстинкционный контур), г – фрагментированный феррит

Перлит в зависимости от способа сварки может присутствовать в двух модификациях: 1) в виде пластинчатого неразрушенного и 2) пластинчатого разрушенного. Пластинчатый перлит – это длинные параллельные (или почти параллельные) чередующиеся и пластины цементита (Fe_3C) и α-фазы (феррита). Изображение перлита приведено на рис.1*а*. По границам зерен разрушенного перлита, как правило, присутствуют частицы цементита имеющие пластинчатую форму (рис.1*б*). Объемная доля перлита зависит от способа сварки (см. ниже рис.2*а*).

Феррит в металле шва при всех способах сварки также присутствует в двух модификациях: 1) в виде нефрагментированного (рис.1*в*) и 2) фрагментированного (рис.1*г*). Фрагментированный феррит – это структура, которая состоит из дислокационных субграниц (стенок фрагментов) и внутреннего пространства, содержащего или не содержащего дислокации. Фрагменты при всех способах сварки – преимущественно изотропные, т.е. выполняется соотношение: $L/D \approx 1$, где L – продольный размер фрагмента, D – его поперечный размер. Фрагменты содержат сетчатую дислокационную структуру. На

дислокациях присутствуют карбидные частицы округлой формы – цементит. Объемная доля феррита также зависит от способа сварки (см. ниже рис.2*а*).

На рис.2 представлено влияние метода сварки на количественные параметры структуры металла шва. Видно, что метод сварки, прежде всего, влияет на содержание морфологических составляющих матрицы металла шва (рис.2*а*). А именно, во-первых, основной объем материала матрицы стали занимает ферритная морфологическая составляющая. Во-вторых, введение искусственных дефектов при сварке методами как РДС, так и импульсной увеличивает объемную долю феррита и уменьшает долю перлита.

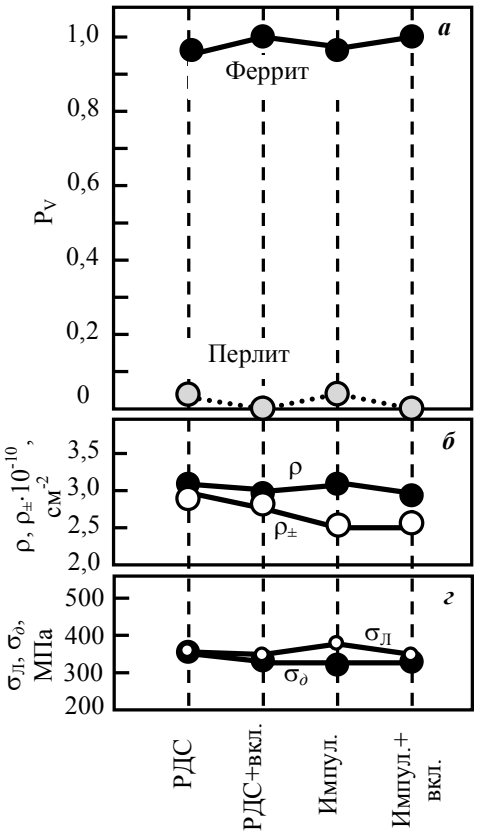


Рис.2. Влияние метода сварки на средние по материалу количественные параметры структуры основного металла

Выше отмечалось, что дислокационная структура во всех морфологических составляющих структуры – сетчатая. Измерения показали, что величина средней скалярной плотности дислокаций слабо зависит от метода сварки (см. рис.2*б*). Тем не менее, как при РДС, так и при импульсном способе сварки введение искусственных дефектов приводит к некоторому уменьшению величины $<\rho>$.

Дислокационная структура при всех способах сварки поляризована. Об этом свидетельствует присутствие во всех морфологических составляющих изгибных экстинкционных контуров. Измерение параметров изгибных экстинкционных контуров позволяет определить кривизну-кручение кристаллической решетки. В общем случае амплитуда кривизны-кручения кристаллической решетки χ равна $\chi = \chi_{пл} + \chi_{упр}$, где $\chi_{пл}$ – пластическая, $\chi_{упр}$ – упругая составляющие χ. Было установлено, что при всех способах сварки в целом по материалу амплитуда кривизны-кручения кристаллической решетки χ характеризуется только пластической составляющей, т.е. $\chi = \chi_{пл}$. А это означает, что кривизна-кручение кристаллической решетки матрицы основного металла остается пластической и сохраняются неравенства: $\rho > \rho_\pm$ и $\sigma_Л > \sigma_\partial$, т.е. скалярная плотность дислокаций ρ больше избыточной $\rho_\pm$, и амплитуда напряжений сдвига $\sigma_Л$ превышает амплитуду внутренних дальнодействующих напряжений σ_∂ (рис.2*в*).

Заключение. В результате проведенных методом ПЭМ исследований установлено, что:

1. морфологическими составляющими независимо от способа сварки являются пластинчатый перлит и феррит, их объемная доля зависит от способа сварки;
2. введение искусственных дефектов при любом способе сварки приводит к разрушению и исчезновению перлитной составляющей;
3. введение искусственных дефектов при любом методе сварки приводит к уменьшению количественных параметров дефектной структуры (ρ, $\rho_\pm$, $\sigma_Л$, σ_∂).

УМЕНЬШЕНИЕ ДОЗЫ ОБЛУЧЕНИЯ ПАЦИЕНТА ПРИ ТОМОГРАФИЧЕСКОМ ИССЛЕДОВАНИИ ПУТЁМ ПРИМЕНЕНИЯ ОПТИМИЗИРОВАННОГО АЛГОРИТМА ОБРАТНОГО ПРОЕЦИРОВАНИЯ

А.Х. Оздиев

Научный руководитель: профессор, д.т.н. Ю.Ю. Крючков

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: ozdiev@tpu.ru

REDUCTION OF RADIATION DOSE BY APPLICATION OF OPTIMIZED FILTERED BACKPROJECTION ALGORITHM

A.H. Ozdiev

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

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

E-mail: ozdiev@tpu.ru

Abstract. *X-Ray tomography is one of widespread methods of medical diagnostics. Due to its opportunity to visualize inside structure of scanned object it allows to diagnose, for example, cancer cells. Modern medical tomographic setups have lots of advantages such as high resolution, which allows to visualize objects of very small size, high level of reproducibility, which allows to verify obtained results, simplicity of utilization etc. There is certain amount of improvements still can be applied. One of most significant challenges is reducing of radiation dose. Diagnostics of complex structures sometimes requires more time of measurements. That means that dose will increase with time. This work proposes optimized filtered backprojection algorithm as solution for the problem of radiation dose level.*

Введение. Доза облучения зависит от плотности потока излучения, площади покрытия и времени облучения. При постоянной плотности потока излучения и фиксированном времени эксперимента доза будет определяться площадью покрытия. Процесс облучения схематично представлен на рисунке 1.

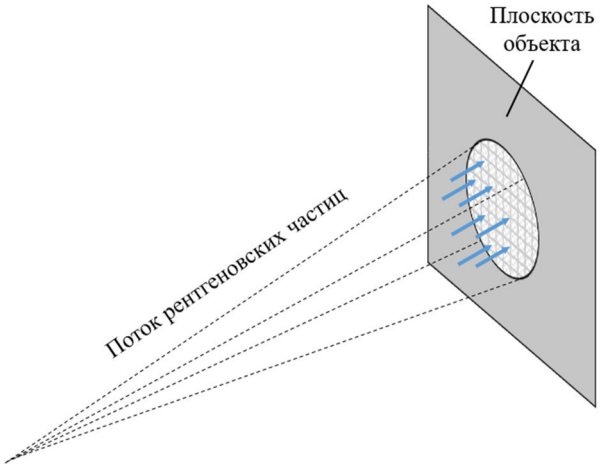


Рис. 1. Процесс облучения объекта пучком рентгеновских частиц

Стандартная геометрия томографического эксперимента [1] предполагает, что объект исследования целиком помещается под излучение. В этом случае величина дозы будет пропорциональна площади покрытия, а также облучению будут подвергаться те области, диагностика которых не требовалась изначально. Совершенствование подхода приобретает дополнительную актуальность, если часть объекта исследования, анализ которой необходимо произвести, располагается в его крайних областях, как показано на рисунке 2.

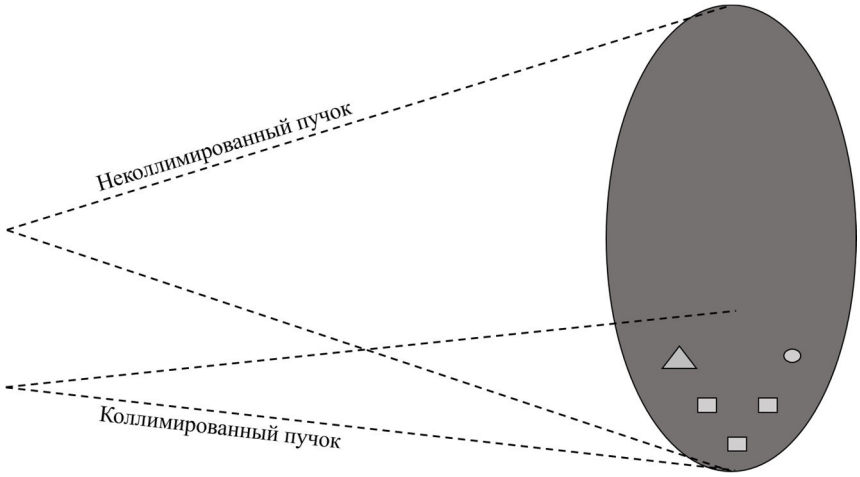


Рис. 2. Коллимация пучка на область интереса внутри объекта исследования (вид сверху)

Оптимизация алгоритма. Сокращение дозы облучения предлагается достигать благодаря сокращению площади облучения путем коллимации пучка на интересующей области исследуемого объекта. В этом случае, как и при стандартной геометрии сканирования, исходными данными для реконструкции будут являться проекции объекта исследования. Однако стандартный алгоритм обратного проецирования [2] не подходит для реконструкции данных, полученных на коллированном пучке. Соответственно алгоритм нуждается в оптимизации, которая заключается в расчете реальных траекторий обратного проецирования [3], и их дальнейшем использовании непосредственно для операций обратного проецирования в процессе реконструкции.

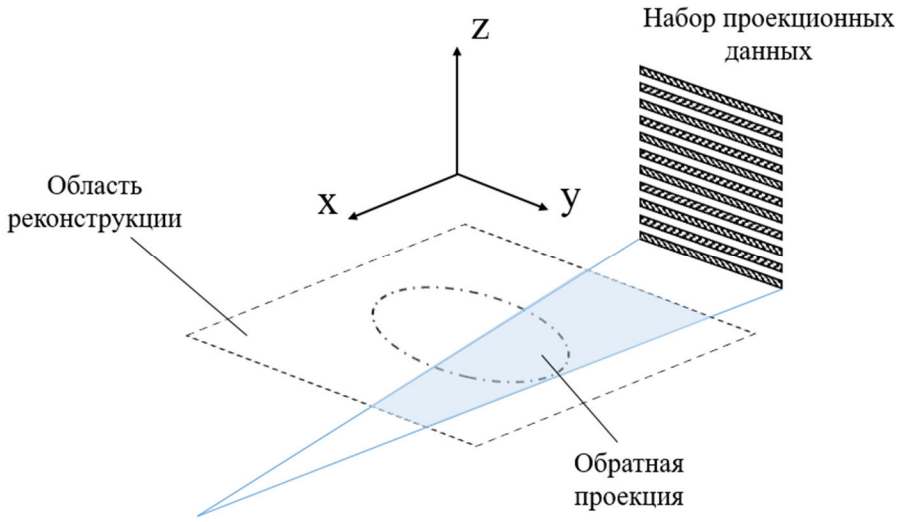


Рис. 3. Обратное проецирование данных, полученных на коллимированном пучке

Моделирование и результаты реконструкции. Для проверки работоспособности предложенного подхода, были смоделированы проекционные данные. На рисунке 4 изображены синограмма для коллимированного пучка и результат реконструкции.

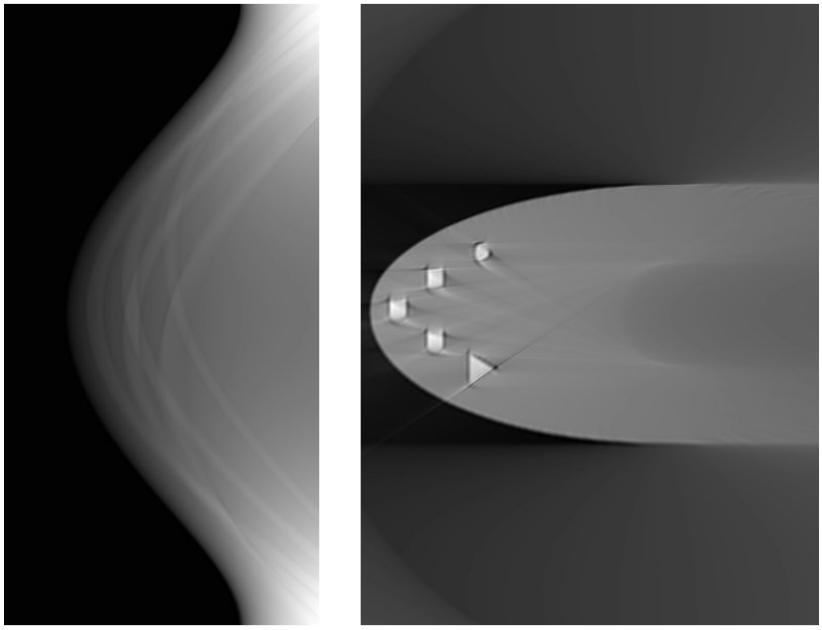


Рис. 4. Слева – синограмма, полученная на коллимированном пучке, справа – реконструкция отсканированной части объекта

В данном случае ширина коллимированного пучка составляла треть от ширины пучка при полном покрытии объекта. Очевидно, что площадь покрытия коллимированного пучка сократилось втрое по сравнению с неколлимированный пучком, а значит и доза облучения также сократилась в 3 раза.

Выводы. Предложенный подход позволяет сократить дозу облучения благодаря коллимации пучка и применению оптимизированного алгоритма обратного проецирования. Представленные в чистом виде – без применения фильтров или техник устранения артефактов – результаты реконструкции, полученные с набора смоделированных проекционных данных, демонстрируют работоспособность предложенного подхода.

Работа выполнена при финансовой поддержке Государственного задания «Наука» в рамках научного проекта № 11.6342.2017/БЧ

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Herman G.T., Fundamentals of Computerized Tomography: Image Reconstruction from Projections, Springer Publishing Company, New York, 2009.
2. Kak A.C., Slaney M., Principles of Computerized Tomographic Imaging, SIAM, Philadelphia 2001, 60p.
3. Оздиев А.Х., Модифицированный алгоритм обратного проецирования для томографической реконструкции при сканировании образца с пошаговым сдвигом // Высокие технологии в современной науке и технике (ВТСНТ-2016) – Томск, 2016 – С. 433–434.

РЕШЕНИЕ ПРОБЛЕМЫ ТОМОГРАФИЧЕСКОГО СКАНИРОВАНИЯ ОБЪЕКТОВ ДЕТЕКТОРАМИ МАЛОГО РАЗМЕРА

А.Х. Оздиев

Научный руководитель: профессор, д.т.н. Ю.Ю. Крючков

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: ozdiev@tpu.ru

SOLUTION TO THE PROBLEM OF TOMOGRAPHIC SCANNING OF OBJECTS BY SMALL AREA X-RAY DETECTORS

A.H. Ozdiev

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

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

E-mail: ozdiev@tpu.ru

Abstract. *Standard X-Ray tomographic setups basically consist of 3 parts: radiation source, mechanics for mounting a sample and detector system. Each part of tomographic setup in one way or another contributes into the quality of reconstructed images. Detector system is responsible for data acquisition process. Development of detectors improves them in terms of resolution, acquisition speed, dark current etc. Such improvements increases costs for producing of detectors as well as their final price. Tomographic scanning of long objects requires using detectors of corresponding size. It makes tomographic setups expensive, because the price of detectors also increases with increasing of their size. Presented work proposes to solve this problem by shifting detector along the longest dimension of the sample and applying optimized filtered backprojection algorithm.*

Введение. Цифровые рентгеновские детекторы имеют следующие основные характеристики: размер активной области детектора, фактор оптической восприимчивости поверхности детектора, размер пикселя, предельное пространственное разрешение, размер матрицы изображения, динамический диапазон, вес и т.д. Очевидно, что с увеличением размера активной области детектора будет увеличиваться его цена. Необходимость проводить томографическое исследование объектов, например, вытянутых вдоль одного из своих измерений может требовать применения детекторов соответствующего размера. Это может привести к нехватке бюджета в условиях его ограниченности.

Рис. 1. Примеры детекторов: Vieworks Vivix-S и Carestream DRX-1

В данной ситуации становятся актуальными методы оптимизации технологии проведения томографического эксперимента, в частности геометрии сканирования и алгоритма реконструкции.

Наиболее простым решением задачи является последовательное смещение детектора вдоль самого длинного измерения объекта, при его полном покрытии пучком излучения, как показано на рисунке 2.

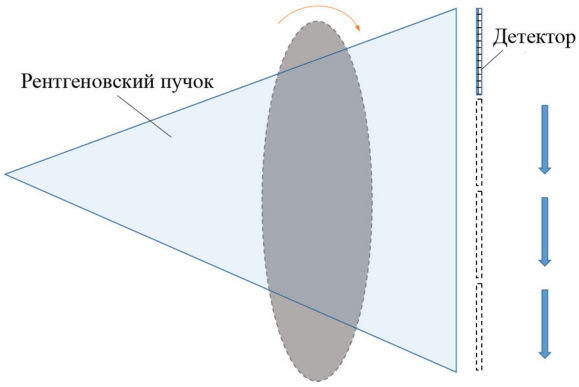


Рис. 2. Схематичное изображение геометрии сканирования при смещении детектора вдоль объекта исследования (вид сверху)

Теоретическая часть. Простейшим алгоритмом реконструкции изображений в компьютерной томографии является алгоритм обратного проецирования, в соответствии с которым оценка плотности u(x, y) вычисляется следующим образом. Проекция p(s, θ) функции двух переменных u(x, y) для каждого значения угла θ представляет собой одномерную функцию. Ее можно преобразовать в двумерную, зафиксировав угол θ и растянув (выполнив обратное проецирование) по всей плоскости (x, y) в соответствии с выражением

$$p_\theta(x, y) = p(x \cdot \cos\theta + y \cdot \sin\theta, \theta) \quad (1)$$

Очевидно, сечение двумерной функции $p_\theta(x, y)$ плоскостью, перпендикулярной плоскости (x, y) и проекция которой на плоскость (x, y) с осью x составляет угол θ, равно p(x, θ). Далее складываем все обратные проекции $p_\theta(x, y)$ для $0 \le \theta \le \pi$. В результате получим суммарное изображение, которое используется в качестве функции плотности u(x, y) [1].

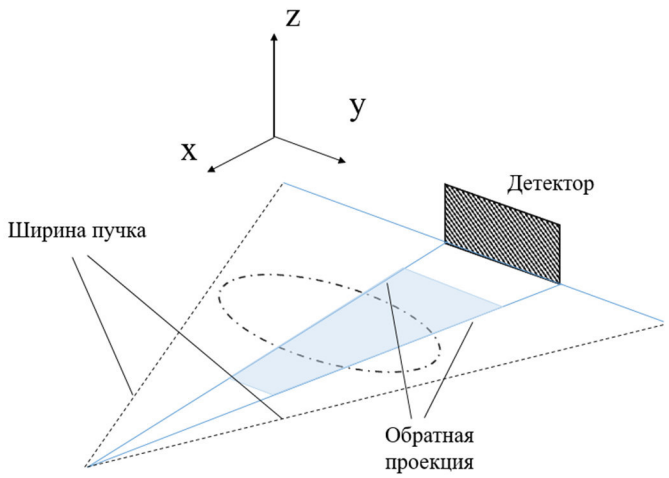


Рис. 3. Схема обратного проецирования при использовании оптимизированного алгоритма

Оптимизация алгоритма заключается в обратном проецировании проекционных данных, полученных на каждом этапе смещения детектора [2], вдоль их реальных траекторий в рассматриваемой области реконструкции, как показана на рисунке 3.

Моделирование. Для моделирования был сгенерирован тестовый образец в виде изображения вытянутого овального объекта с большим количеством легкоидентифицируемых форм внутри для проверки работоспособности алгоритма. Сбор всех обратных проекций, полученных на каждом этапе смещения детектора и их дальнейшее складывание между собой позволили получить реконструированное изображение сгенерированного фантома.

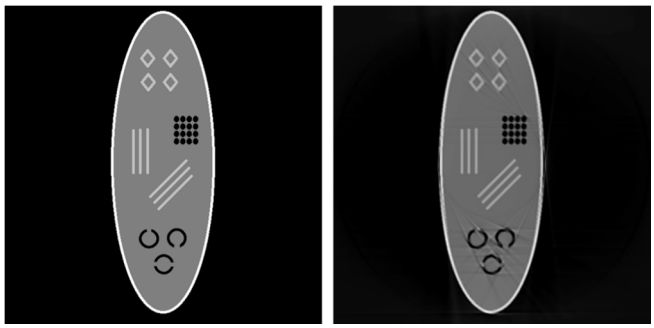


Рис. 4. Фантом слева и его реконструированного изображение справа

Представленный результат реконструкции не подвергался дополнительной фильтрации и обработке алгоритмами устранения артефактов, на что указывают полосовые артефакты, которые вызваны «склеиванием» частей объекта реконструированных отдельно. Реконструкции частей тестового объекта для трех этапов смещения детектора представлены на рисунке 5.

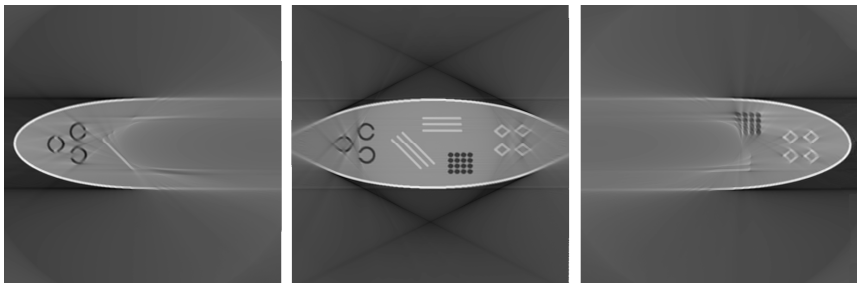


Рис. 5. Результаты реконструкции с трех этапов смещения детектора

Выводы. Результаты моделирования и реконструкции демонстрируют работоспособность предложенного подхода. Применение оптимизированного алгоритма обратного проецирования может позволить применять детекторы, размеры которых уступают размерам исследуемых объектов, что позволит значительно сократить расходы на покупку оборудования при проектировании установки для рентгеновской томографии.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Государственного задания "Наука", в рамках научного проекта №11.6342.2017/БЧ

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Грузман И.С., Киричук В.С., Косых В.П., Перетягин Г.И., Спектор А.А. Цифровая обработка изображений в информационных системах: Учебное пособие. - Новосибисрк: Изд-во НГТУ, 2002. - 352 с.
2. Оздиев А.Х., Модифицированный алгоритм обратного проецирования для томографической реконструкции при сканировании образца с пошаговым сдвигом // Высокие технологии в современной науке и технике (ВТСНТ-2016) – Томск, 2016 – С. 433–434.

СТРУКТУРА СУБМИКРОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВОВ Cu – Al

Д.А. Осипов

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. Е.Ф. Дударев

Научный консультант: доцент, к.ф.-м.н. Т.Ю. Малеткина

Национальный исследовательский Томский государственный университет,

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

E-mail: osipov_ff_tsu@mail.ru

STRUCTURE SUBMICROCRYSTALLINE ALLOYS Cu – Al

D.A. Osipov

Scientific Supervisor: Prof., Dr. E.F. Dudarev

Scientific Consultant: Assoc. Prof., Cand. T. Yu. Maletkina

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

E-mail: osipov_ff_tsu@mail.ru

Abstract. *According to experimental data and the proposed models for all modes of severe plastic deformation, fragmentation of the grain structure in metals and alloys is ensured by the development of shear plastic deformation without the formation of pores and microcracks. Structure of copper and alloys Cu – 5 at. % Al after cold rolling and abc-pressing was researched by methods of backscattered electrons and X-ray diffraction. And it founded that after rolling the grain-subgrain structure remains submicrocrystalline with follower dynamic recrystallization.*

Введение. Согласно экспериментальным данным и предложенным моделям при всех способах интенсивной пластической деформации фрагментация зеренной структуры в металлах и сплавах обеспечивается развитием сдвиговой пластинчатой деформации без образования пор и микротрещин. В результате образуются субзерна и зерна с малоугловыми и большеугловыми границами, то есть формируется зеренно-субзеренная структура[1, 2]. До сих пор изучению влияния энергии дефекта упаковки на закономерности и механизмы фрагментации зеренной структуры уделялось мало внимания. При исследовании никеля, меди и алюминия, которые имеют разные энергии дефекта упаковки, и температуры плавления, фактически проводили интенсивную пластическую деформацию при разных гомологических температурах, что могло оказать существенное влияние на формирование субмикрокристаллической структуры. Поэтому необходимы исследования одной и той же системы сплавов с сильно отличающейся энергией дефекта упаковки при небольшом отличии температуры плавления. В полной мере этому условию удовлетворяют бинарные сплавы системы Cu - Al. У них с увеличением концентрации алюминия (с) в пределах твердого раствора сильно понижается энергия дефекта упаковки γ (в меди – 0,060 Дж/м^2, а в сплаве Cu – 5 ат. % Al – 0,027 Дж/м^2), температура плавления изменяется незначительно [3].

Материалы и методы исследования. Для исследований использовались образцы из меди и сплава меди с алюминием Cu – 5 ат. % Al (медь чистотой 99, 95 % и алюминий чистотой 99, 99 %), полученные при плавке в высокочастотной печи в атмосфере аргона. В качестве исходных заготовок для получения образцов в субмикрокристаллическом состоянии при холодной прокатке использовали

образцы с субмикрокристаллической структурой, сформированной при abc-прессовании, которые деформировали при комнатной температуре прокаткой с суммарной степенью сжатия поперечного сечения прутка ~ 86 %. Для исследования зеренно-субзеренной структуры использовали метод EBSD – анализа на растровом электронном микроскопе CarlZeiss EVO 50 с приставкой для ДОЭ анализа NORDLYS Oxford Instruments HKL Technology, и программным обеспечением CHNNEL 5, а также рентгеновскую дифрактометрию на дифрактометре XRD – 6000, CuK_{α} – излучение.

Результаты. В результате интенсивной пластической деформации методом abc-прессования с последующей глубокой пластической деформацией прокаткой в меди и сплаве Cu – 5 ат. % Al сформировалась однородная по объему образца субмикрокристаллическая структура (рисунок 1). Форма

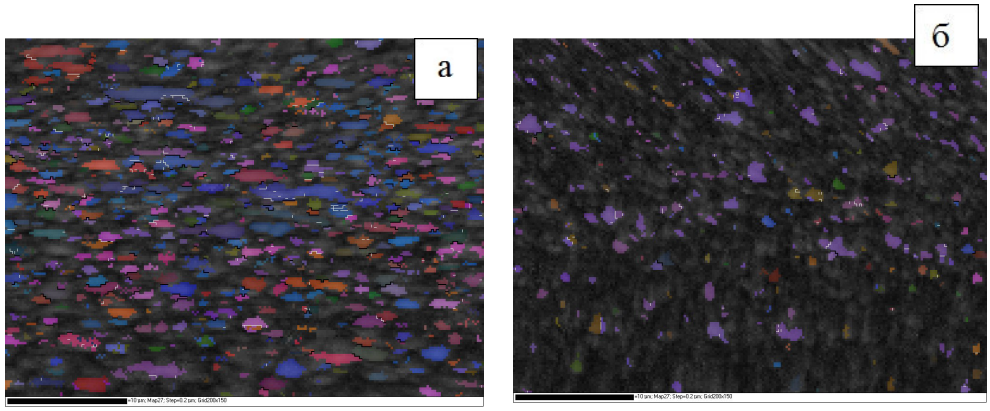


Рис. 1 Карта распределения зерен по ориентациям в меди (а) и в сплаве Cu – 5 ат. % Al (б) после abc-прессования и холодной прокатки при комнатной температуре.

зерен близка к равноосной с наличием в зернах наибольшего размера оборванных малоугловых границ. Эта зеренно-субзеренная структура, подобна структуре сформированной при abc-прессовании. Однако по сравнению со структурой после abc-прессования, средний размер зерен после прокатки увеличился в меди с 0,43 до 0,63 мкм и в сплаве Cu – 5 ат. % Al с 0,27 до 0,51 мкм. Это увеличение является следствием разных тензоров напряжения, развитием процессов возврата и динамической рекристаллизации, а также расширением интервала распределения в сторону большего размера с 1,6 до 2 мкм у меди и с 1,1 до 1,65 мкм в сплаве (рисунок 2).

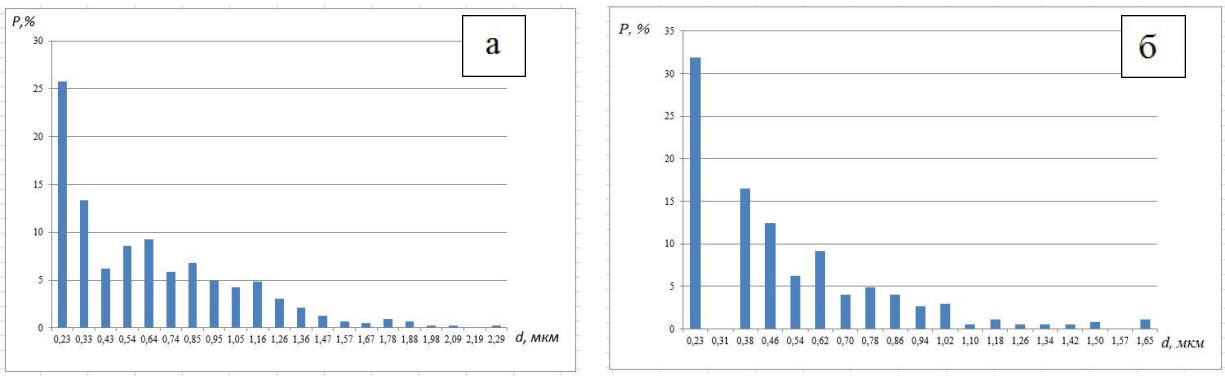


Рис. 2 Гистограмма распределения элементов зеренно-субзеренной структуры по размерам в меди (а) и в сплаве Cu – 5 ат. % Al (б) после abc-прессования и холодной прокатки при комнатной температуре.

Рентгеновские дифрактограммы меди (рисунок 3) и сплава (рисунок 4) свидетельствуют, что после abc-прессования, в обоих образцах преимущественной ориентации вдоль оси сжатия являются

плоскости {111}. После прокатки текстура изменяется. В меди ориентация плоскости {200} становится определяющей перпендикулярно оси сжатия, а в сплаве в этом сечении основой становится плоскость {220}.

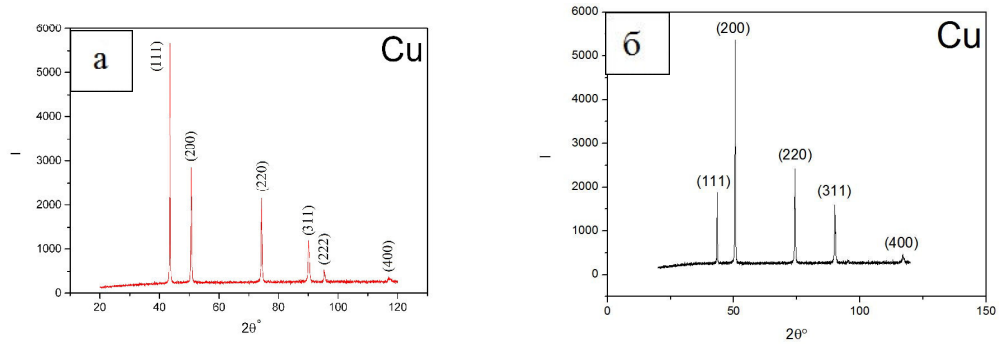


Рис. 3 Рентгеновские дифрактограммы меди после abc-прессования (а) и холодной прокатки при комнатной температуре (б).

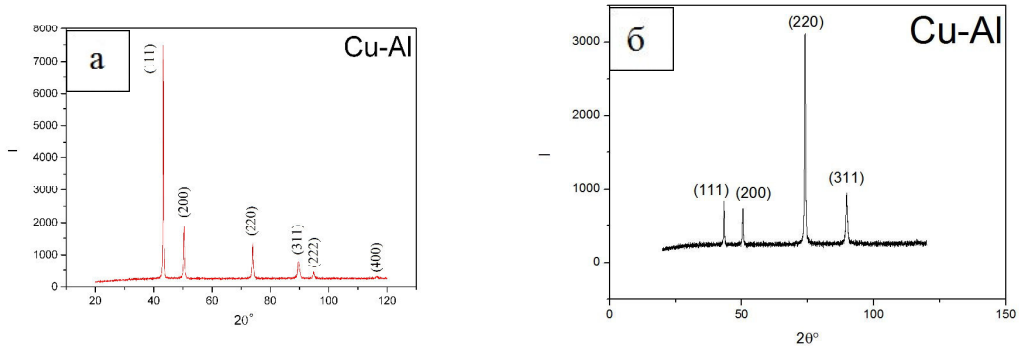


Рис.4 Рентгеновские дифрактограммы сплава Cu – 5% Al после abc-прессования (а) и холодной прокатки при комнатной температуре (б).

Заключение. Методами рентгеновской дифрактометрии и EBSD – анализа установлено, что в результате прокатки стал больше не только средний размер элементов зеренно-субзеренной структуры, но и размер областей когерентного рассеяния: в меди он увеличился с 51 нм до 192 нм, а в сплаве – с 41 нм до 80 нм. Причем после прокатки, как и после abc-прессования, размер областей когерентного рассеяния остался в сплаве меньше, чем в меди. Кроме того после прокатки деформация кристаллической решетки увеличилась у меди с $0{,}4\cdot10^{-3}$ до $1{,}4\cdot10^{-3}$, а у сплава с $1{,}5\cdot10^{-3}$ до $2{,}2\cdot10^{-3}$. Всё это свидетельствует о том, что глубокая пластическая деформация привела к увеличению внутренних напряжений 2-го рода и интенсивности фрагментации зеренно-субзеренной структуры.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дударев Е.Ф., Табаченко А. Н., Бакач Г. П., Скосырский А. Б., Кашин О. А., Осипов Д. А. Влияние легирования меди алюминием на параметры субмикрокристаллической структуры, сформированной при abc – прессовании // Изв. вузов. Физика. – 2015. – Т. 58, № 11. – С. 166–168.
2. Зернограничная диффузия и свойства наноструктурных материалов / Под ред. Ю.Р. Колобова. – Новосибирск: «Наука», 2001. – 216 с.
3. Thoronton P.R. The dependence of double cross–slipping process stacking–fault in face–centered cubic metals and alloys // Phil. mag. – 1962. – V. 7. – № 80. – P. 1349–1369.

ОРИЕНТАЦИОННАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ТЕРМИЧЕСКОГО И МЕХАНИЧЕСКОГО ГИСТЕРЕЗИСА В МОНОКРИСТАЛЛАХ СПЛАВА $Ni_{51}Fe_{18}Ga_{27}Co_4$

К.С. Осипович

Научный руководитель: доцент, 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

ORIENTATION DEPENDENCE OF THERMAL AND MECHANICAL HYSTERESIS IN $Ni_{51}Fe_{18}Ga_{27}Co_4$ 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. *The orientation dependence of thermal ΔT and mechanical $\Delta\sigma$ hysteresis was investigated in $Ni_{51}Fe_{18}Ga_{27}Co_4$ single crystals as-grown with isobaric (shape memory effect) and isothermal (superelasticity) experiments. Single crystals oriented along the [001]-direction show a high reversible deformation of $\varepsilon_{ЭПФ}^{001}$ = (4,0 ± 0,2) % for martensitic transformations, small thermal hysteresis ΔT = (22 ± 2) K and mechanical $\Delta\sigma^{001}$ = (47 ± 2) МПа hysteresis, as compared with to single crystals oriented along the [110]-direction. Such orientation dependence is determined by the contribution of the $L1_0$-martensite under the ε_{detw} in deformation of transformation.*

Введение. Сплавы NiFeGa(Co) испытывают $B2(L2_1)$-10M/14M-$L1_0$ мартенситные превращения (МП) в ферромагнитном состояние и могут найти широкое практическое применение в качестве преобразователей магнитной и тепловой энергии в механическую работу [1]. Важным параметром, определяющим коэффициент полезного действия в циклах преобразования, является величина рассеянной энергии при развитии обратимых МП. Величина рассеяния энергии характеризуется термическим гистерезисом ΔT при развитии прямого и обратного МП при охлаждении/нагреве под действием постоянных внешних напряжений при проявлении эффекта памяти формы (ЭПФ) или механическим гистерезисом $\Delta\sigma$ при развитии МП при постоянной температуре в циклах разгрузка/нагрузка при изотермических испытаниях в условиях сверхэластичности (СЭ).

Известно, что при проявление ЭПФ и СЭ обратимая деформация определяется деформацией превращения, которая включает в себя процессы переориентации и раздвойникования кристаллов мартенсита. Поэтому выяснение влияния процессов раздвойникования вариантов мартенсита на величину ΔT и $\Delta\sigma$, функциональные свойства представляет интерес для практического использования.

Для изучения ориентационной зависимости ΔT и $\Delta\sigma$ в настоящей работе рассматриваются монокристаллы $Ni_{51}Fe_{27}Ga_{18}Co_4$ (ат. %) в исходном состояние, ориентированных вдоль двух [001]- и [110]-направлений, с различным вкладом деформации раздвойникования в деформацию превращения.

Теоретически показано, что при развитии $B2(L2_1)$-$L1_0$ МП под нагрузкой вдоль выбранных направлений наблюдаются максимальные значения деформации превращения ε_{tr0} = 6,2 % при сжатии, связанная с образованием сдвойникованного варианта мартенсита ε_{CVP} и деформация, обусловленная его последующим раздвойникованием под нагрузкой ε_{detw} [2]. Вклад раздвойникования в величину ε_{tr0} при деформации сжатием вдоль [001]-направления отсутствует ε_{detw} = 0 %, а при сжатии вдоль [110]-направления составляет почти 50 %: $\varepsilon_{CVP} \approx 3{,}0$ % и $\varepsilon_{detw} \approx 3{,}2$ %.

Материалы и методы исследования. Монокристаллы $Ni_{51}Fe_{18}Ga_{27}Co_4$ были выращены по методу Бриджмена в атмосфере инертного газа. Образцы для испытания были врезаны на электроискровом станке с длиной 6 мм и размером поперечного сечения 3 х 3 мм^2. Ориентация образцов была определена на рентгеновском дифрактометре «Дрон-3» с использованием $Fe_{K\alpha}$-излучения. Перед испытанием образцы шлифовали и полировали в электролите H_3PO_4 + Cr_2O_3 при T = 293 К, U = 17 В. Металлографические наблюдения проводили на цифровом измерительном микроскопе Keyence VHX-2000. Механические испытания проводили на установке ИМРС в циклах охлаждения/нагрева при постоянной внешней нагрузки с выводом кривых $\varepsilon(T)$ на компьютер, скорость охлаждения и нагрева составляла 7 К/мин и на установке Instron VHS 5969 со скоростью деформации 10^{-3} 1/с при постоянной температуре испытания.

Результаты. Монокристаллы $Ni_{51}Fe_{27}Ga_{18}Co_4$ при $T = T_{комн}$ находятся в двухфазном состояние ($L2_1 + \gamma$). Причем в $L2_1$-фазе присутствует (13,5 ± 0,5) % объемная доля γ-фазы, которая не испытывает МП (рис. 1).

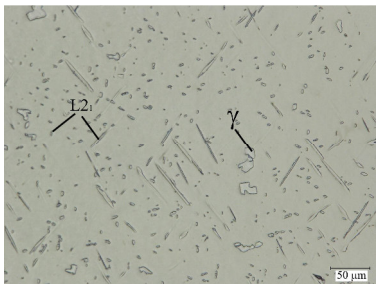


Рис. 1. Металлография поверхности монокристаллов сплавов $Ni_{51}Fe_{18}Ga_{27}Co_4$

На рисунке 2 видно, что при $\sigma_{внеш}$ = 30 МПа в монокристаллах, ориентированные вдоль [001]- и [110]-направления, величина термического гистерезиса одинакова $\Delta T \approx 20$ К, но величина эффекта памяти формы в [001]-кристаллах $\varepsilon_{ЭПФ}^{001}$=(1,8 ± 0,2) %, почти в 4 раза больше, чем в [011]-кристаллах $\varepsilon_{ЭПФ}^{110}$ = (0,5 ± 0,2) %. Значит, для [110]-монокристаллов требуются большие напряжения для ориентированного роста мартенсита, чем для [001]-монокристаллов. При увеличении внешней нагрузки до $\sigma_{внеш}$ = 150 МПа термический гистерезис в [001]-кристаллах уменьшается, а в [011]-кристаллах, наоборот, увеличивается и $\Delta T^{001} = 2{*}\Delta T^{110}$, различия $\varepsilon_{ЭПФ}^{001} > \varepsilon_{ЭПФ}^{110}$ сохраняется.

Монокристаллы $Ni_{51}Fe_{18}Ga_{27}Co_4$ (ат. %) при изотермических испытаниях при $T = T_{комн}$ с одинаковой заданной деформацией 5,4 % демонстрируют СЭ (рисунок 2). Причем вдоль [110]-направления при развитии обратимых МП наблюдается необратимая деформация ~1,3 % на кривых $\sigma(\varepsilon)$ и ~ 0.3% на кривых $\varepsilon(T)$, в отличие [001]-направления, где величина обратимой деформации СЭ полностью

совпадает с заданной деформацией. Механический гистерезис в [001]-монокристаллах составляет $\Delta\sigma^{001}$ = (47 ± 2) МПа, а в [110]-монокристаллах величина $\Delta\sigma^{110}$ сильно зависит от степени деформации и при $\varepsilon_{зад}$ = 5,4 % $\Delta\sigma^{110}$ = (172 ± 2) МПа почти в 4 раза больше, чем $\Delta\sigma^{001}$. В [001]-монокристаллах высокий уровень рассеяния энергии при исследование ЭПФ и СЭ по сравнению [001]-монокристаллами может быть связан с наличием вклада раздвойникования в величину деформации превращения в [110]-монокристаллах $Ni_{51}Fe_{18}Ga_{27}Co_4$ (ат. %) и с более низкими прочностными свойствами мартенсита.

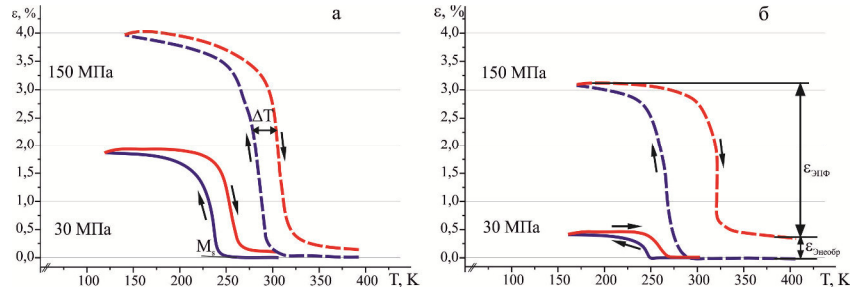


Рис. 2. Кривые ε(T) для монокристаллов сплава $Ni_{51}Fe_{18}Ga_{27}Co_4$ *в состояние после роста вдоль: а – [001]-направления; б – [110]-направления*

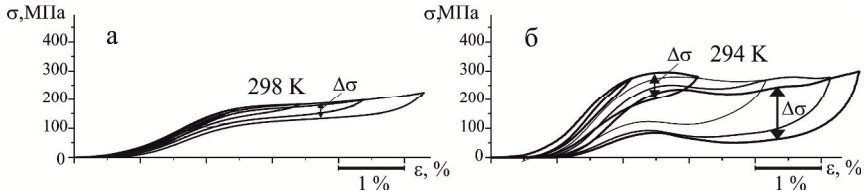


Рис. 3. Кривые сверхэластичности σ(ε) для монокристаллов сплава $Ni_{51}Fe_{18}Ga_{27}Co_4$ *вдоль: а – [001]-направления; б - [110]-направления*

Заключение. Экспериментально показано, что вклад раздвойникования $L1_0$-мартенсита под нагрузкой ε_{detw} в деформацию превращения определят ориентационную зависимость термического ΔT и механического Δσ гистерезиса в [001]- и [110]-монокристаллах $Ni_{51}Fe_{18}Ga_{27}Co_4$ (ат. %). Если величина ε_{detw} ≈ 3,2 % при ε_{tr0} = 6,2 %, как в [110]-монокристаллах, то развитие обратимых МП характеризуется высокими значениями рассеяния энергии, как при изобарических ΔT = (57 ± 2) К, так и при изотермических испытаниях $\Delta\sigma^{110}$ = (183 ± 2) МПа. В [001]-монокристаллах $Ni_{51}Fe_{18}Ga_{27}Co_4$ (ат. %), для которых ε_{detw} ≈ 0 % при ε_{tr0} = 6,2 %, величины термического ΔT = (22 ± 2) К и механического $\Delta\sigma^{001}$ = (47 ± 2) МПа в 2 и почти 4 раза меньше, чем [110]-монокристаллах, соответственно.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 16-19-10250.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Zheng H., Xia M., Liu J., Huang Y., Li J. Martensitic transformation of $Ni_{55.3}Fe_{17.6}Ga_{27.1})_{100-x}Co_x$ magnetic shape memory alloys // Acta Materilia. – 2005. – V. 53. P. 5125–5129.
2. Hamilton R.F., Sehitoglu H., Efstathiou C., Maier H.J. Mechanical response of NiFeGa alloys containing second-phase particles // Scripta Materilia. – 2007. – V. 55. P.497–499.

КОНТРОЛЬ ЭФФЕКТИВНОСТИ ЭЛЕКТРОПОРАЦИИ С ПОМОЩЬЮ ИЗМЕРЕНИЯ ПРОВОДИМОСТИ ТКАНЕЙ

Ф.А. Пак

Научный руководитель: доцент, к.ф-м.н.. А.Н. Алейник

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: fap1@tpu.ru

CONTROL OF ELECTROPORATION EFFICIENCY BY MEASURING THE CONDUCTIVITY OF THE TISSUES

F.A. Pak

Scientific Supervisor: Assoc. Prof., Dr.A.N. Aleinik

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

E-mail: fap1@tpu.ru

Abstract. *The method for measuring the efficiency of the electroporation process for living tissue is offered. The method consists in measuring the conductivity of tissue before and after the electroporation process. The measurements confirmed the efficiency of the method.*

Введение. Электропорация представляет собой процесс, при котором проницаемость мембраны клеток увеличивается при подаче на них коротких электрических импульсов. Этот эффект основывается на заряжении мембран клеток. Мембрана клетки служит для того, чтобы изолировать содержимое клетки. Внешняя мембрана клеток млекопитающих состоит их двойного слоя липидов толщиной примерно 5 нм. Интенсивные электрические поля влияют на перенос веществ через внешнюю мембрану.

Известно, что мембрана клетки имеет определённое сопротивление R электрическому току I, которое остаётся постоянным при разности потенциалов $\Delta\varphi$ между двумя сторонами мембраны [1]. Т.е. для мембраны сохраняется закон Ома: $I = \varphi/R$. Закон соблюдается при разности потенциалов не выше 300 мВ. При разности потенциалов выше 300 мВ, ток резко увеличивается, что приводит к возникновению дефектов в мембране клетки. Это явление называется электрическим пробоем или электропорацией. При удалении разности потенциалов на мембране происходит уменьшение размеров пор. Связано это с тем, что на мембране, при образовании дефекта, увеличивается площадь раздела фаз “липид-вода”, что приводит к увеличению силы поверхностного натяжения воды на границе раздела фаз [2].

В нормальных условиях под действием сил натяжения мембрана клетки «затягивается», размеры пор уменьшаются, и мембрана восстанавливается. Но при увеличении разности потенциалов, после преодоления энергетического барьера, образование пор становится самопроизвольным, что приводит к разрушению клетки. Для моделирования прохождения электрического тока через мембрану клетки, клетка представляется в виде эквивалентной электрической цепи. Цитоплазма клетки в эквивалентной цепи представляется в виде резистора с сопротивлением R_c=100 Ом*см. Мембрану клетки можно представить в виде конденсатора, ёмкость C_m которого равна 10^{-6} Ф/см и сопротивлением около 1000 Ом*см^2. Так как. клетка находится в среде, то среду клетки можно представить в виде суспензии описываемой сопротивлением R_s емкостью C_s. Эти величины линейно зависят от сопротивления среды ρ

и диэлектрической постоянной ε соответственно. Также представим каналы мембраны в виде управляемых проводников с проводимостью G_i (i=1,2,3…), соединённых последовательно с источниками тока U_i (i=1,2,3…). Тогда эквивалентную цепь для мембраны клетки можно представить в следующем виде.

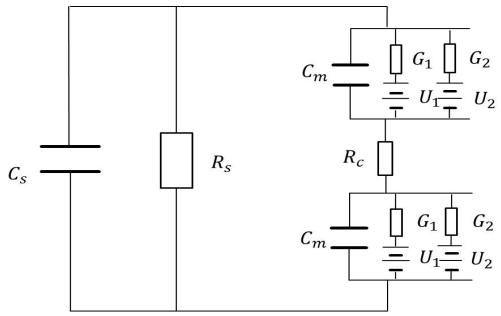


Рис. 1. Эквивалентная схема клетки в растворе, C_s, R_s-сопротивление и емкость раствора, C_m-ёмкость мембраны, G_i и U_i - проводники и источники напряжения управляемых каналов мембраны.

Экспериментальная часть. Увеличение проницаемости может быть постоянным (необратимое) или временным (обратимое) в зависимости от параметров электрических импульсов. Оба вида применяются в медицинских приложениях. Обратимая электропорация в настоящее время широко используется для введения или удаления макромолекул из отдельных клеток. В течение двух последних десятилетий обратимая электропорация стала применяться при работе с живыми тканями для генной инженерии и доставки лекарств. Эффективность электропорации in vivo зависит от многих факторов [3]. Измерение пассивных электрических параметров для контроля эффективности электропорации для индивидуальных клеток и клеточных структур проведено в работе [4,5]. В настоящей работе показана возможность контроля эффективности электропорации в живых тканях путем измерения их проводимости.

На кафедре ПФ ФТИ ТПУ был создан макет прибора для электропорации. Блок-схема прибора показана на рис.2

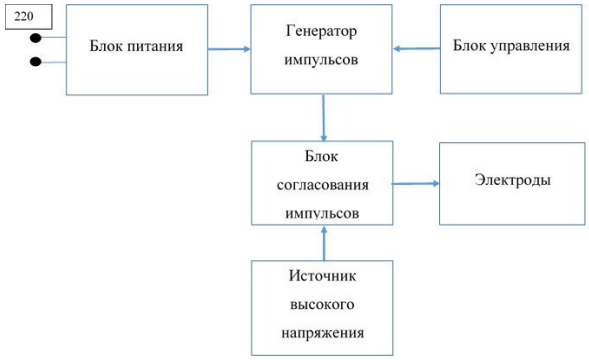


Рис. 2. Блок схема прибора для электропорации

Прибор питается от сети. Управляющим элементом является микроконтроллер ATmega 16, который определяет длительность и количество подаваемых импульсов. Усиленные импульсы через

схему согласования подаются на электроды. Длительность импульсов меняется в пределах 10 – 100 мксек, а их колияество от 1 до 15. Для измерения проводимости тканей во время подачи импульсов была выбрана следующая схема. В цепь электрода последовательно включалось небольшое сопротивление, которое служило для измерения тока. Подаваемое на электроды напряжение для измерения снижалось с помощью делителя. Оба сигнала подавались на два входа осциллографа, в результате чего происходило одновременное измерение импульсных значений тока и напряжения. Из этих величин расчитывалось измеренное значение проводимости ткани.

Результаты. Изменение проводимости ткани во времени после электропорации показано на рисунке 3. Это измерение проводилось с помощью анализатора импеданса.

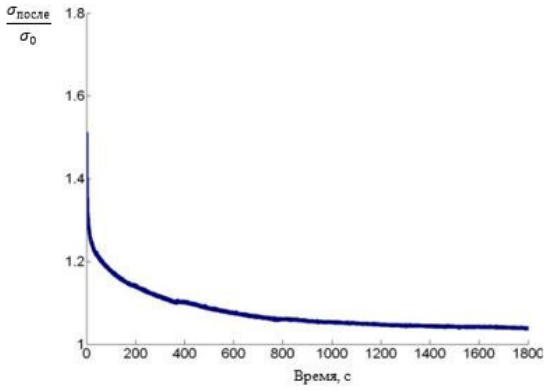


Рис.3. Изменение проводимости ткани во времени после подачи импульсов.

Величина относительной проводимости измерялась в течение 30 минут после подачи импульсов. Как видно из рисунка проводимость вначале резко падает. Затем скорость спада уменьшается и после 30 минут достигает начального значения, т.е. до подачи импульсов. Данный результат показывает, что мембраны клеток не повредились, т.е произошло обратимое восстановление свойств мембран. Таким образом, предложенный метод позволяет оценить правильность выбора электрических параметров электропорации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Cima L. F., Mir L.M. Macroscopic characterization of cell electroporation in biological tissue based on electrical measurements. // Appl. Phys. Lett. –2004 –№85– 520–522.
2. DeBruin K. A, Krassowska W. Modeling electroporation in a single cell: I. Effects of field strength and rest potential // Biophys. *J.* – 1999 –№ 77 –213–224.
3. Cegovnik U., Novakovic S. Setting optimal parameters for in vitro electrotransfection of B16F1 SA1 LPB and CHO cells using predefined exponentially decaying electric pulses // Bioelectrochemistry –2004 –№62 - 73–82.
4. Huang Y, Rubinsky B. Micro-electroporation: improving the efficiency and understanding of electrical permeabilization of cells // Biomed. Microdevices –1999– №2 –145–150.
5. Glahder J., Norrild B., Persson M. B. and Persson B. R. Transfection of HeLa-cells with pEGFP plasmid by impedance power-assisted electroporation // Biotechnol. Bioeng. – 2005– № 92 – 267–276.

ВЛИЯНИЕ РАЗМЕРА ЧАСТИЦ НА ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛОВ СПЛАВА НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА FeNiCoAlNb

М.Ю. Панченко

Научный руководитель: гл. н. с., д.ф.-м.н. И.В. Киреева, профессор, д.ф.-м.н. Ю.И. Чумляков

Национальный исследовательский Томский государственный университет,

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

E-mail: panchenko.marina4@gmail.com

EFFECT OF PARTICLE SIZE ON FUNCTIONAL AND MECHANICAL PROPERTIES OF SINGLE CRYSTALS OF IRON-BASED FeNiCoAlNb ALLOY

M.Yu. Panchenko

Scientific Supervisor: chief researcher, Dr. I.V. Kireeva, Prof., Dr. Yu.I. Chumlaykov

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

E-mail: panchenko.marina4@gmail.com

Abstract. *It is shown that [001]-single crystals Fe-28%Ni-17%Co-11.5%Al-2.5Nb (at. %) alloy aged at T=973 K, 1−20 hours are observed γ'-phase particle size of 3-25 nm, which give rise to thermoelastic of the γ-α' martensitic transformation. The effect of size of γ'-phase particle on the critical stress of high temperature phase, the temperature range of superelasticity and the mechanical hysteresis are investigated.*

Введение. В последнее время конструкционные материалы с функциональными свойствами привлекают все больше внимание исследователей. Известно, что сплавы на основе железа имеют атомно-неупорядоченную структуру, и, как правило, в них наблюдаются нетермоупругие мартенситные превращения (МП) [1]. При выделении наноразмерных частиц γ'-фазы атомно-упорядоченной по типу $L1_2$ в сплаве на основе железа FeNiCoAlNb $\gamma-\alpha'$ МП становится термоупругим (γ-ГЦК – гранецентрированная кубическая решетка, α'-ОЦТ − объемно-центрированная тетрагональная решетка) и наблюдается ЭПФ и СЭ [2-3]. Для успешного практического применения данных сплавов необходимо выяснить влияние размера частиц на осевые напряжения $\sigma_{0.1}$ высокотемпературной фазы, величину СЭ и механический гистрезис в монокристаллах сплава Fe-28%Ni-17%Co-11.5%Al-2.5Nb (ат. %).

Материалы и методы исследования. Монокристаллы сплавов Fe–28%Ni–17%Co–11.5%Al–2.5%Nb (ат.%) выращивали методом Бриджмена в среде инертного газа. Для исследования были выбраны монокристаллы, ориентированные вдоль [001]-направления, так как данная ориентация при растяжении обладает максимальным теоретическим значением деформации решетки ε_0[001]=8,7 % при $\gamma-\alpha'$ МП [1]. После роста монокристаллы гомогенизировали при 1553 К, 6 ч в среде инертного газа. Старение монокристаллов проводили при температуре 973 К в течение 1-20 ч в среде инертного газа с последующей закалкой в воду. Механические свойства исследовали на испытательной машине Instron-5969 при скорости деформации $4\cdot10^{-4}$ $с^{-1}$ в интервале температур от 77 до 550 К.

Результаты. Электронно-микроскопические исследования показали, что с увеличением времени старения при температуре T=973 К размер частиц r увеличивается от 3–5 нм при старении в течение 1

часа до 18 – 25 нм при 20 часах. Частицы γ'-фазы имеют когерентное сопряжение с матрицей, о чем свидетельствуют области диффузного рассеяния вокруг фундаментальных рефлексов (рис. 1).

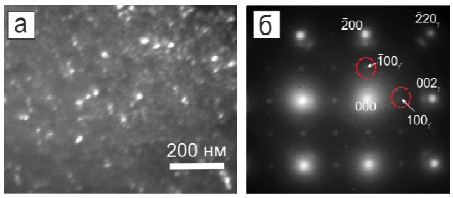


Рис.1. Электронно-микроскопическое наблюдение частиц γ'-фазы в [001] монокристаллах сплава FeNiCoAlNb, состаренных при 973К, 10 ч: (а) – темнопольное изображение; (б) – микродифракционная картина к (а);

Исследования температурной зависимости электрического сопротивления $\rho(T)$ монокристаллов FeNiCoAlNb с размером частиц γ'-фазы r<18 нм (старение 1–10 ч), показали, что изменений на зависимости ρ(T), связанных с γ–α' МП не обнаружено при охлаждении до 77 К и при нагреве до 400 К, следовательно, температура прямого МП при охлаждении Ms в монокристаллах FeNiCoAlNb с малым размером частиц γ'-фазы находится ниже температуры жидкого азота. При размере частиц r=18 – 25 нм (старение 20 ч) на зависимости $\rho(T)$ наблюдается γ–α' МП и Ms=116 К (рис. 2). Следует отметить, что получить полную петлю на кривой зависимости $\rho(T)$ не удается из-за низких значений температуры конца МП при охлаждении Mf .

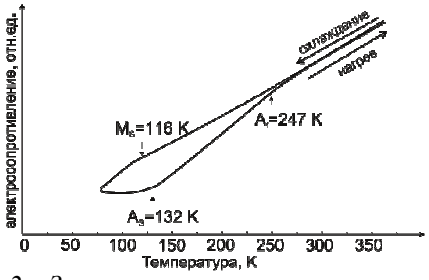


Рис.2 – Зависимость электросопротивления от температуры для монокристаллов FeNiCoAlNb , состаренных при 973 К, 20 ч.

На рис. 3 представлены данные исследования влияния размера частиц γ'-фазы на уровень напряжений $\sigma_{0.1}$ исходной высокотемпературной фазы, температурный интервал СЭ $\Delta T_{сэ}$, величину СЭ и механического гистерезиса $\Delta\sigma$ [001]-монокристаллах сплава FeNiCoAlNb.

Анализ результатов, представленных на рис. 3а показывает, что в [001]-монокристаллах сплава FeNiCoAlNb на зависимости $\sigma_{0.1}(r)$, где напряжения $\sigma_{0.1}$ высокотемпературной фазы определяли при $T = M_d$ (кривая 1) и при температуре выше M_d T = 460 К (кривая 2), наблюдается три стадии: первая стадия – стадия роста напряжений $\sigma_{0.1}$ при времени старения 1–5 часов и размером частиц r =3–5 нм; затем вторая стадия – стадия насыщения $\sigma_{0.1}$, напряжения растут слабее и достигают своего максимального значения при размере частиц r=10–14 нм; третья стадия – стадия падения $\sigma_{0.1}$ при r>14 нм. Известно, что при срезании скользящими дислокациями когерентных с матрицей частиц уровень прочностных свойств высокотемпературной фазы определяется размером и объемной долей частиц и описывается соотношением (1):

$$\sigma_{cr} = 3 \cdot G \cdot E^{3/2} \cdot (f \cdot r / b)^{1/2} \qquad (1)$$

Здесь G – модуль сдвига высокотемпературной фазы, $E = \Delta a/a$ – параметр несоответствия решеток высокотемпературной фазы и частицы ($\Delta a = a_м - a_ч$); f – объемная доля частиц; r – радиус частицы; b – модуль вектора Бюргерса скользящей дислокации. Из соотношения (1) следует, что, чем больше r и f, тем выше уровень напряжений высокотемпературной фазы. Это совпадает с полученными экспериментальными данными по исследованию зависимости $\sigma_{0.1}(r)$ при $r \leq 12$ нм. При размере частиц

r>12 нм наблюдается уменьшение уровня напряжений $\sigma_{0.1}$ высокотемпературной фазы. Обычно падение уровня напряжений связывают с потерей когерентности частиц. В монокристаллах FeNiCoAlNb с использованием электронной микроскопии было показано, что при r=12–25 нм частицы γ'-фазы имеют когерентное сопряжение с исходной фазой, и уменьшение напряжений $\sigma_{0.1}$, связано с выделением частиц хрупкой β-фазы при длительных временах старения [2].

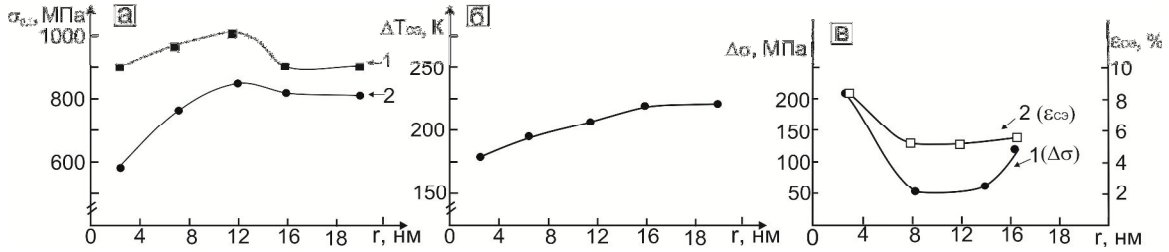


Рис. 3а – Зависимость осевых напряжений $\sigma_{0.1}$ при 1) $T = M_d$ и 2) T = 460 К (а); механического гистерезиса $\Delta\sigma$ и величины сверхэластичности $\varepsilon_{сэ}$ при температуре испытания 77 К (б); температурного интервала сверхэластичности $\Delta T_{сэ}$(в) от размера частиц для [001]-монокристаллов сплава FeNiCoAlNb;

Уровень критических напряжений высокотемпературной фазы определяет зависимость температурного интервала СЭ $\Delta T_{сэ}$, механического гистерезиса $\Delta\sigma$ и величины СЭ $\varepsilon_{сэ}$ от размера частиц γ'-фазы. Температурный интервал СЭ $\Delta T_{сэ}$ (рис. 3б) при размере частиц r=3–5 нм равен $\Delta T_{сэ}$=178 К увеличивается до $\Delta T_{сэ}$=220 К при размере частиц r=16–25 нм. Максимальное значение механического гистерезиса $\Delta\sigma$=220 МПа и величины СЭ $\varepsilon_{сэ}$=8,5 % наблюдается при размере частиц r=3–5 нм, а при размере частиц r=8–14 нм механический гистерезис равен $\Delta\sigma$=50–60 МПа и $\varepsilon_{сэ}$=6 %. Это коррелирует с данными зависимости $\sigma_{0.1}(r)$ (рис 3а), чем меньше размер частиц r, тем ниже уровень напряжений высокотемпературной фазы $\sigma_{0.1}$, тем больше $\Delta\sigma$ и $\varepsilon_{сэ}$.

Вывод. Таким образом, на монокристаллах сплава Fe-28%Ni-17%Co-11.5%Al-2.5%Nb (ат. %) показано, что при старении 1–20 ч выделяются частицы γ'-фазы размером r=3–25 нм, которые приводят к появлению термоупругих $\gamma-\alpha'$ МП. Показано что размер частиц γ'-фазы определяет уровень напряжений $\sigma_{0.1}$ исходной высокотемпературной фазы, температурный интервал сверхэластичности $\Delta T_{сэ}$, механический гистерезис $\Delta\sigma$ и величину сверхэластичности. Таким образом, изменяя размер частиц γ'-фазы можно управлять механическими и функциональными свойствами сплава на основе железа FeNiCoAlNb.

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда (проект №14-29-00012).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Olson G. B, Cohen M. (1972) A mechanism for the strain-induced nucleation of martensitic transformation // Journal of the Less-Common Metals Vol. 28. pp. 107-118.
2. Чумляков Ю. И., Киреева И.В., Куц О.А., Панченко М.Ю., Карака Э., Майер Г. Эффект памяти формы и сверхэластичность в [001]-монокристаллах ферромагнитного сплава FeNiCoAlNb(B) // Известия Вузов. Физика. – 2015. – Т. 58. – № 7. – С. 16–23.
3. Omori T, Kainuma R, Abe S., Tanaka Y (2013) Thermoelastic martensitic transformation and superelasticity in Fe-Ni-Co-Al-Nb-B polycrystalline alloy // Scripta Materialia Vol. 69. pp. 812–815.

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ИСТОЧНИКА ПИТАНИЯ МАГНЕТРОНА НА СВОЙСТВА ПЛЁНОК НИТРИДА КРЕМНИЯ

Ю.В. Петраков, Д.В. Киселева
Научный руководитель: к.т.н. Ю.Н. Юрьев
Национальный исследовательский Томский политехнический университет
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050
e-mail: necroplazma@gmail.com

STUDY ON THE INFLUENCE OF THE MAGNETRON POWER SUPPLY ON THE PROPERTIES OF THE SILICON NITRIDE FILMS

Y.V. Petrakov, D.V. Kiseleva
Scientific Supervisor: Ph.D. Y.N. Yurjev
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050
e-mail: necroplazma@gmail.com

Abstract. *Silicon nitride (Si_3N_4) films were deposited by magnetron sputtering of silicon target in ($Ar+N_2$) atmosphere with refractive index 1.95 - 2.05. The results of Fourier transform infrared (FTIR) spectrophotometry showed Si-N bonds in the thin films with concentration $2.41 \cdot 10^{23} – 3.48 \cdot 10^{23}$ cm^{-3}. Dependences of deposition rate, optical characteristics and surface morphology on rate of N_2 flow and properties of magnetron power supply.*

Введение. Для получения плёнок Si_3N_4 может быть использован метод магнетронного распыления, который способен производить покрытия без использования токсичных реагентов и с высокими функциональными характеристиками [1, 2]. Свойства получаемых покрытий зависят как от параметров их осаждения, так и от параметров источника питания.

Целью работы является исследование влияния параметров осаждения и характеристик источника питания магнетронной распылительной системы на свойства плёнок нитрида кремния.

Материалы и методы исследования. В эксперименте была использована магнетронная распылительная система с дисковым кремниевым катодом и источники питания со следующими параметрами: источник напряжения, имеющий два режима работы: на постоянном токе (DC) и импульсном токе с частотой 100 кГц, а также источник тока с частотой 134 кГц. Осаждение производилось при поддержании постоянного значения потока аргона (18 $см^3$/мин) и различных значениях потока азота (4,5 – 10,5 $см^3$/мин).

Оптические постоянные плёнок и их толщины были измерены методом эллипсометрии на приборе Эллипс 1891 САГ. Методом ИК-Фурье спектроскопии (прибор Инфралюм ФТ-801) были исследованы присутствующие в покрытиях связи атомов и рассчитаны их концентрации.

Результаты. При реактивном осаждении одним из значительных влияний на скорость роста тонких плёнок является соотношение между реактивным и плазмообразующим газами. Зависимость скорости осаждения плёнок нитрида кремния от скорости потока азота Q(N2) в рабочую камеру для всех использованных источников питания представлена на рис. 1.

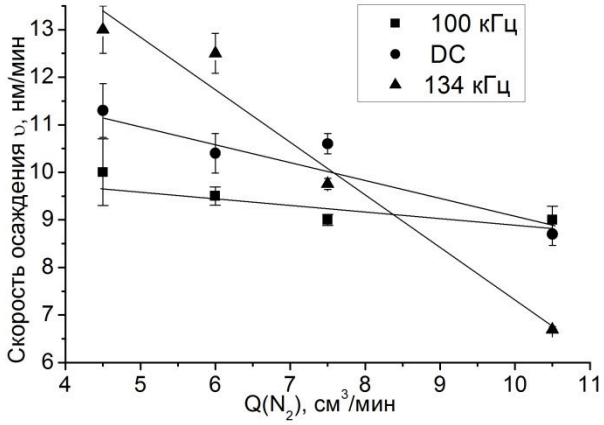


Рис. 1. Зависимость скорости осаждения от потока азота.

Из графика видно, что скорость осаждения нитрида кремния уменьшается при увеличении скорости потока азота в камеру. Это связано с тем, что происходит азотирование мишени, и на ее поверхности образуется слой нитрида кремния, коэффициент распыления которого ниже, чем у чистого кремния [3].

Результаты измерений зависимостей показателя преломления плёнок Si_3N_4 от потока азота для различных источников питания показаны на рис. 2.

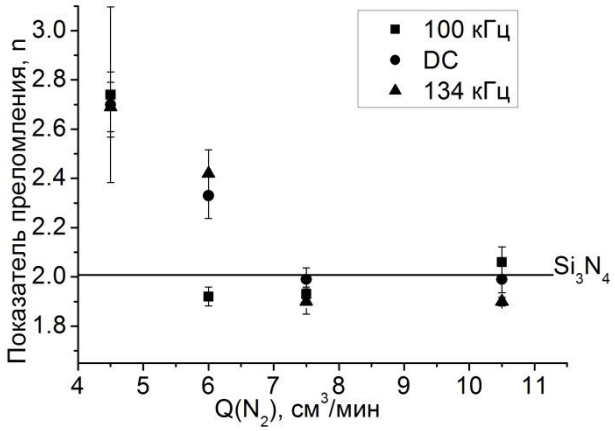


Рис. 2. Показатель преломления пленок нитрида кремния.

Из рисунка видно, что с увеличением потока азота коэффициент преломления покрытий снижается в независимости от типа источника питания. При потоках азота 7-11 см^3/мин плёнки обладают коэффициентами преломления близкими к стехиометрическому Si_3N_4 (n=1,95 – 2,05) [6].

Таблица 1.

Концентрации связей Si-N

$Q(N_2)$, см^3/мин	Концентрации связей $n \cdot 10^{23}$, см$^{-3}$		
	100 кГц	DC	134 кГц
4,5	2,86	3,38	2,41
6	3,07	3,24	2,58
7,5	3,52	3,11	2,76
10,5	3,28	3,13	2,61

Методом ИК-Фурье спектроскопии были исследованы присутствующие в покрытиях связи атомов и их концентрации. В таблице представлены результаты расчётов концентрации связей Si-N в зависимости от потока реактивного газа в камеру для различных источников питания магнетрона. Полученные значения согласуются с данными для плазмохимического метода получения плёнок Si_3N_4 [7].

Заключение. В результате проведенных исследований было установлено, что скорость осаждения пленок Si_3N_4 линейно зависит от скорости потока азота в камеру: увеличение потока N_2 приводит к уменьшению скорости. При этом источник питания оказывает незначительное влияние, за исключением режимов с малым потоком азота.

Увеличение скорости потока N_2 в рабочую камеру приводит к уменьшению показателя преломления с 2,7 до 1,9. При скорости потока азота 7,5 $см^3$/мин и 10,5 $см^3$/мин показатель преломления пленок соответствует стехиометрическому Si_3N_4 (n = 1,95 – 2,05).

Результаты ИК-Фурье спектроскопии показали наличие наличии в плёнках только связей Si-N. Их концентрация практически не зависит от параметров электрического питания магнетрона и равна (2,41 – 3,48) ·1023 $см^{-3}$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ковалгин А.Ю. Исследование процессов плазмохимического осаждения пленок нитрида кремния: дис. … канд. техн. наук: – СПб., 1995. – 237 с.
2. Silicon nitride deposited by inductively coupled plasma using dichlorosilane and ammonia [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://www.researchgate.net/publication/228864159_Silicon_nitride_deposited_by_inductively_coupled_plasma_using_dichlorosilane_and_ammonia - 17.01.17
3. Musil J. and all. Reactive magnetron sputtering of thin films: present status and trends. _ Thin Solid Films, 475 (2005), 208-218.
4. Оскирко В.О. Импульсный биполярный источник питания для магнетронных распылительных систем: дис. … канд. тех. наук: Томск. 2016. – 197 с.
5. Inductively coupled plasma chemical vapour deposition (ICP-CVD). [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://www.oxfordplasma.de/pla_news/wh_paper/OIPT-White%20paper-ICPCVD-March2010.pdf – 20.01.17
6. Characterisation of the silicon nitride thin films deposited by plasma magnetron / A. Batan, A. Franquet, J. Vereecken and F. Reniers // The 12th European Conference on Applications of Surface and Interface Analysis. – Brussels, Belgium, 2008. – Vol. 40, Iss. 3–4. – P. 754–757
7. Кутков И.В. Качественный и количественный анализ пленок нитрида кремния методом ИК-спектроскопии/ Кутков И.В., Пехтелев М.И. – Журнал Доклады Томского государственного университета систем управления и радиоэлектроники. 1 (31), 2014 – 92-94 с.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭКСТРАКЦИИ ВЕЩЕСТВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ИМПУЛЬСНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ

Е.В. Петренко, А.А. Иванов
Научный руководитель: к.т.н. А.С. Юдин
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 2а, 634050
E-mail: petrozhenya7@mail.ru

STUDY OF THE SUBSTANCE EXTRACTION UNDER THE PULSE ELECTRIC FIELD

E.V. Petrenko, A.A. Ivanov
Scientific Supervisor: PhD, A.S. Yudin
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 2a, 634050
E-mail: petrozhenya7@mail.ru

Abstract. *The article is devoted to the intensification of extraction using a pulsed electric field (PEF). This technology, based on the high intensity of the PEF object, minimizes the possibility of contamination of the extract by the products of electric erosion of electrodes as compared to the electric discharge technology, and also has a number of advantages over traditional methods and their modifications due to the quality and speed of extraction. The experiment presented in the article clearly demonstrates the difference in the results, depending on the choice of the pulse parameters.*

Введение. В настоящее время растительное сырье является одним из главных объектов переработки в пищевой, фармацевтической, химической и других отраслях промышленности. Одной из задач экстракционной переработки растительного сырья является сокращение затрат энергии и времени традиционных методов извлечения полезных компонентов (мацерация, перколяция) [1], которые в ряде случаев достигли своего естественного предела. Одним из путей решения такой задачи является применение технологии обработки сырья импульсным электрическим полем (ИЭП).

Потенциальные преимущества данной технологии были продемонстрированы на мобильной испытательной установке, названной *KEA* (*Karlsruher Elektroporations Anlage* — Карлсруйская электрополяризационная установка) для экстракции сока из сахарной свеклы [2] и электропорации вина [3], а также данная технология была использована для извлечения веществ из софоры японской [4]. Задача данного исследования состоит в определении возможности извлечения веществ из клеток растительного сырья, а также постановки проведения дальнейших исследований.

Материалы и методы исследования. С целью исследования воздействия ИЭП на различные вещества было поставлено 2 эксперимента. Воздействию подвергался черный чай, экстракт которого повседневно используется в качестве тонизирующего напитка, и водоросль хлорелла, как наиболее быстрорастущий одноклеточный организм, компоненты которого являются ценными для пищевой косметической и животноводческой отраслей промышленности. Для исследования влияния ИЭП на степень экстракции чая была собрана конструкция, представляющая собой систему двух электродов из нержавеющей стали находящихся в воде на расстоянии 1 см, площадью около 8 см^2, между которых

помещался пакетик чая. На электроды подавалось импульсное напряжение амплитудой 4,5 кВ, длительностью 1 мкс и частотой следования 1000 и 2000 имп./сек в течение 1 минуты. Общее время нахождения пакетиков чая в воде составляло 3 мин. Регистрировалась температура воды до и после воздействия ИЭП. Для уменьшения влияния системных погрешностей использовались емкости двух видов: одноразовые пластиковые стаканы и фарфоровые кружки, а также отбирались контрольные образцы. В качестве индикатора степени экстракции был выбран кофеин. Сравнение степени экстракции производилось с образцами необработанными ИЭП. Результаты измерений представлены в таблице 1.

Для исследования воздействия ИЭП на хлореллу была изготовлена рабочая ячейка, представляющая собой электродную систему, состоящую из двух электродов закрепленных на предметное стекло с помощью этилцианакрила (супер клей) с межэлектродным промежутком 0,25 мм. Площадь электродов составила 11,25 мм^2, емкость ячейки и её сопротивление, при использовании водопроводной воды в качестве сольвента, составили 33 пФ и 200 Ом соответственно.

Для обеспечения напряженности ИЭП в межэлектродном промежутке порядка десятков кВ/см был рассчитан и собран источник импульсов, позволяющий регулировать параметры: $t_{имп}$ = 0,1…200 мкс; U = 40…400В. Жидкость с хлореллой вносилась в межэлектродный промежуток, который затем накрывался покрывным стеклом. После чего, рабочая ячейка устанавливалась под микроскоп для наблюдения за состоянием клеток хлореллы. Затем на электроды подавалась серия из 10 импульсов напряжения, заданной длительности и амплитуды с частотой 2 имп/сек. Данный цикл повторялся 5 раз.

Результаты. По результатам газовой хроматографии образцов чая было выявлено, что в образцах 5,6 и 7 кофеин обнаружен в следовых количествах, что было ожидаемо, т.к. данные образцы не подвергались воздействию ИЭП. В то же время в образцах 1,2,3,4 и 8 обработанных ИЭП, его содержание колеблется от 730 до 2750 отн. ед. Необходимо отметить, что в образце 9 кофеин был обнаружен в следовых количествах. Ошибка может быть вызвана случайными факторами и требует проверки. Также газовая хроматография подтвердила, что в образцах подвергавшихся одинаковым условиям обработки ИЭП обнаруживается примерно одинаковое содержание кофеина. При этом наибольшая концентрация наблюдается в образце 2, который подвергался воздействию ИЭП при f = 2000 имп/сек.

Таблица 1

Результаты воздействия ИЭП на черный чай

Образец	Тара	f, имп./сек	$t_{до}$, °C	$t_{после}$, °C	кофеин, отн. ед.
1	фарф. стакан	1000	20	24,5	750
2	пласт. стакан	2000	20	30	2750
3	фарф. стакан	2000	20	27,5	2000
4	пласт. стакан	1000	20	24,5	730
5 – исход. вода	фарф. стакан	2000	20	28,5	–
6 – без ИЭП	фарф. стакан	–	20	20	след.
7 – без ИЭП	пласт. стакан	–	20	20	след.
8 – контроль 3	фарф. стакан	2000	20	27,5	2000
9 – контроль 4	пласт. стакан	1000	20	24,5	след.

В ходе эксперимента с хлореллой было поставлено несколько опытов с различными параметрами импульса. В первом опыте длительность импульса составила 5 мкс, а амплитуда 400 В, напряженность поля в межэлектродном промежутке составила 16 кВ/см. При данных параметрах импульса разрушение клеток хлореллы идентифицировано не было.

В следующем опыте длительность импульса была увеличена до 10 мкс, вследствие чего уже на 3 цикле опыта было замечено образование органической взвеси, что, возможно, свидетельствует о нарушении целостности клеток.

В третьем опыте длительность была увеличена до 20 мкс при той же амплитуде. В результате чего на 3 цикле опыта было замечено образование органической взвеси как и в предыдущем опыте, однако на 5 цикле зафиксировано изменение структуры большинства клеток хлореллы и гораздо более интенсивное образование органической взвеси (Рис. 1), природа которой на данном этапе исследований не установлена. Для этого необходимо провести дополнительные исследования химического состава раствора до и после обработки.

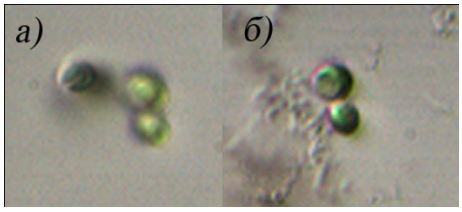


Рис. 1. Опыт 3. Клетки хлореллы а) – до обработки ИЭП; б) – после обработки ИЭП: кратность увеличения 400х

Выводы. Проведя анализ результатов, можно заключить, что воздействие ИЭП на растительные объекты способствует экстракции содержащихся в них компонентов. При обработке чая в воде комнатной температуры происходит заметное увеличение кофеина в экстракте. Увеличение взвеси при обработке суспензии с водорослью хлорелла, косвенно подтверждает образование пор в оболочке клеток, а при увеличении длительности импульсов наблюдается рост образования указанной взвеси и интенсивности нарушения целостности клеток. Однако необходимо учесть, что данный эффект возможен и по причине нагрева жидкости в межэлектродном промежутке. Дальнейшие исследования будут направлены на получение ответа на этот вопрос, а также оптимизацию параметров импульса напряжения с целью поиска наиболее эффективных режимов экстракции.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Головкин В.А. «Методы экстракции растительного и животного сырья» [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://fromserge.narod.ru/lecture/L6.htm – 14.12.16.
2. Stängle K., Wolf A., Müller G., "Operation of an electroporation device for mash" – 17th Int. Pulsed Power Conf., Washington, D.C., June 28 – July 2, 2009
3. Блум Х. «Схемотехника и применение мощных импульсных устройств» – Москва. 2008 – 346 с.
4. Казуб В.Т., Кошкарова А.Г., Семенова Н.Н., Соловьева Е.В. «Интенсификации процессов водного экстрагирования» // Вестник ТГТУ. – 2014. – Т.20. № 3. – С. 496 – 501.

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ И ВЛИЯНИЯ ВНЕШНЕГО ДАВЛЕНИЯ НА ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА СОЕДИНЕНИЙ $A^{II}Mg_2Bi_2$ (A^{II} = Mg, Ca, Sr, Ba)

Е. К. Петров

Научный руководитель: доцент, к.ф.-м.н. В. М. Кузнецов

Национальный Исследовательский Томский Государственный Университет

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

E-mail: eg901petrov@gmail.com

THEORETICAL INVESTIGATION OF ELECTRONIC BAND STRUCTURE AND EXTERNAL PRESSURE EFFECT ON ELECTRONIC PROPERTIES OF $A^{II}Mg_2Bi_2$ (A^{II} = Mg, Ca, Sr, Ba)

E. K. Petrov

Scientific Supervisor: Associate Prof., Ph.D. V. M. Kuznetsov

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

E-mail: eg901petrov@gmail.com

Abstract. *The results of theoretical investigation of electronic band structure and topological properties of $A^{II}Mg_2Bi_2$ (A^{II} = Mg, Ca, Sr, Ba) using exact exchange are presented. It was found that Mg_3Bi_2 in its equilibrium state is a semimetal, and the other three compounds are direct band gap semiconductors. Also uniaxial strain of ternary compounds is predicted to lead to transitions to topologically non-trivial phases, such as topological insulator, topological and Dirac semimetal. Due to such wide range of topologically non-trivial phases these compounds may be interesting for further theoretical and experimental studies.*

Введение. В последнее время большое внимание уделяется изучению материалов с нетривиальными топологическими свойствами: топологических изоляторов [1–3] и дираковских полуметаллов [4–7]. В силу своих экзотических свойств, эти материалы являются многообещающими в плане их использования при создании электронных приборов нового поколения. Поэтому поиск и изучение таких материалов является актуальной задачей физики конденсированного состояния вещества.

Принципиальную роль в образовании топологически нетривиальных состояний в материале играет спин-орбитальное взаимодействие. Одним из наиболее простых способов управления топологическими свойствами представляется «усиление» спин-орбитального взаимодействия путем замещения атомов легких элементов более тяжелыми изоэлектронными аналогами, в результате чего материал может приобрести нетривиальные топологические свойства. Другой способ – различного рода деформация (гидростатическое сжатие, одноосная деформация и т.п.), в результате которой происходит изменение параметров кристаллической решетки. Комбинирование этих двух методов может позволить обнаружить соединения, в которых при определенных условиях возможно существование топологически нетривиальных фаз. Реализации этого подхода и посвящена данная работа.

Представлены результаты первопринципного теоретического исследования электронной структуры и топологических свойств соединений $A^{II}Mg_2Bi_2$ (A^{II} = Mg, Ca, Sr, Ba) в равновесном состоянии, под влиянием гидростатического давления и одноосной деформации.

Метод исследования. Расчеты проведены в рамках формализма теории функционала электронной плотности методом проекционных плоских волн, реализованном в программном коде VASP [8,9]. Для улучшения согласия расчетов с экспериментальными данными в расчет был включен точный обмен. Это было сделано за счет использования гибридного обменно-корреляционного функционала HSE06 [10, 11], хорошо зарекомендовавшего себя в расчетах электронных свойств полупроводниковых систем.

Результаты. В настоящей работе проведено первопринципное теоретическое исследование электронной структуры и топологических свойств группы соединений $A^{II}Mg_2Bi_2$ (A^{II} = Mg, Ca, Sr, Ba) в равновесном состоянии, а также под влиянием гидростатического давления и одноосной деформации с использованием точного обмена. Показано, что в равновесном состоянии соединение Mg_3Bi_2 является полуметаллом, а $CaMg_2Bi_2$, $SrMg_2Bi_2$ и $BaMg_2Bi_2$ представляют собой полупроводники с прямой фундаментальной запрещенной щелью 304, 255 и 249 мэВ соответственно, о чем свидетельствуют рассчитанные энергетические спектры (рис.1). В случае гидростатического давления в трехкомпонентных соединениях обнаружен переход полупроводник – полуметалл без изменения топологических свойств.

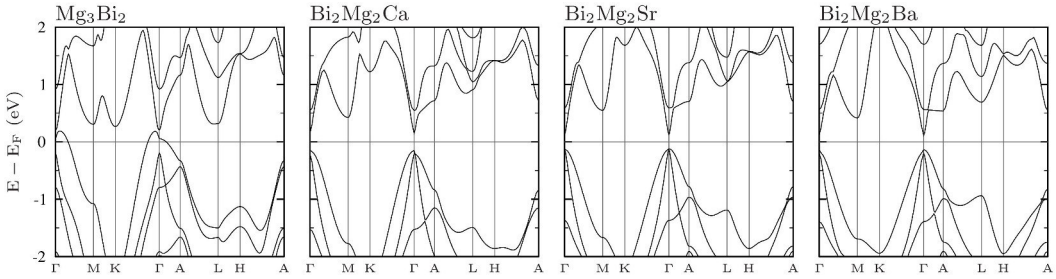


Рис. 1. Энергетические спектры рассматриваемых соединений в равновесном состоянии

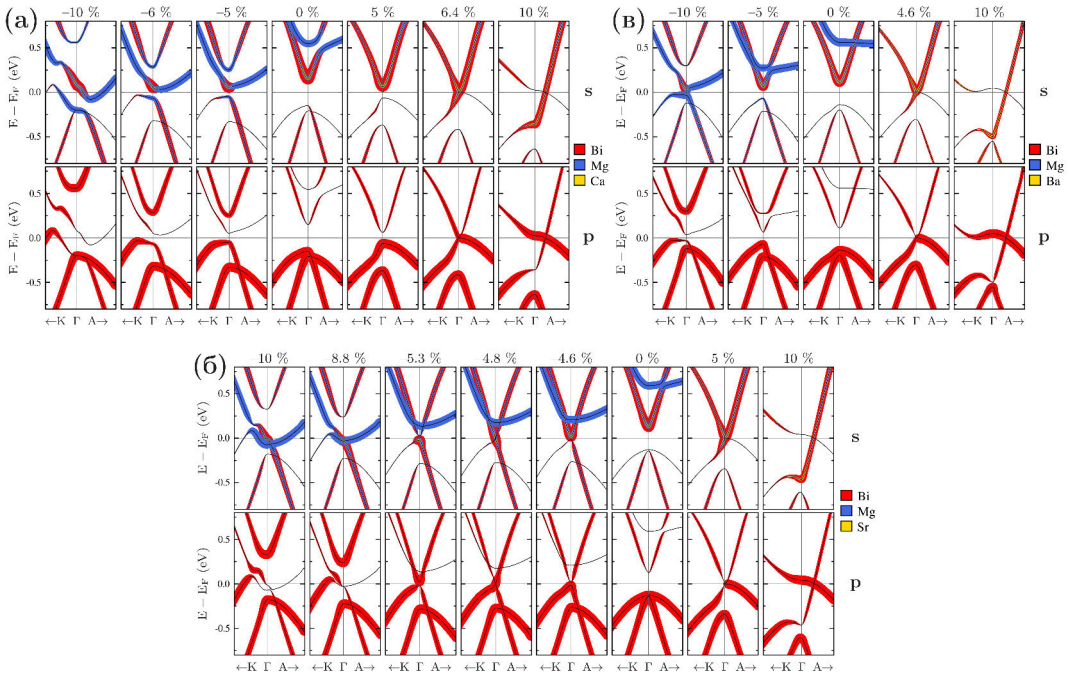


Рис. 2. Эволюция электронной структуры соединений $CaMg_2Bi_2$ (а), $SrMg_2Bi_2$ (б) и $BaMg_2Bi_2$ (в) при одноосном сжатии и растяжении. Цветом (см. легенду) показаны вклады s- (верхний ряд) и p-состояний (нижний ряд) компонентов соединений на фоне электронного энергетического спектра (черные линии). Толщина цветных линий пропорциональна вкладу соответствующих состояний

В случае одноосной деформации трехкомпонентных соединений ситуация кардинально меняется (рис 2). В результате одноосного растяжения соединения $CaMg_2Bi_2$, $SrMg_2Bi_2$ и $BaMg_2Bi_2$ из полупроводниковой фазы переходят в фазу дираковского полуметалла. Одноосное сжатие приводит к более богатому спектру наблюдаемых электронных фаз. В соединении $CaMg_2Bi_2$ реализуется последовательность фазовых переходов полупроводник – топологический изолятор – топологический полуметалл, в соединении $SrMg_2Bi_2$ – полупроводник – дираковский полуметалл – топологический изолятор – топологический полуметалл, а в $BaMg_2Bi_2$ – полупроводник – топологический изолятор. Стоит отметить, что одноосная деформация Mg_3Bi_2 не приводит к изменениями топологических свойств.

Выводы. Обобщая вышесказанное, можно сделать вывод, что существует возможность управления топологическими свойствами соединений $CaMg_2Bi_2$, $SrMg_2Bi_2$ и $BaMg_2Bi_2$ путем одноосного растяжения или сжатия. В случае соединения Mg_3Bi_2 ни один из рассмотренных видов деформации не приводит к качественным изменениях электронного спектра и топологических свойств. Благодаря богатому спектру топологически нетривиальных фаз соединения $CaMg_2Bi_2$, $SrMg_2Bi_2$ и $BaMg_2Bi_2$ могут представлять интерес для дальнейших теоретических и экспериментальных исследований.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Eremeev S.V. Effect of the Atomic Composition of the Surface on the Electron Surface States in Topological Insulators $A_2^VB_3^{VI}$ / S.V. Eremeev, Yu.M. Koroteev, E.V. Chulkov // JETP Lett. – 2010. – V. 91. – № 8. – P. 387–391.
2. Henk J. Complex Spin Texture in the Pure and Mn-Doped Topological Insulator Bi_2Te_3 / J. Henk, A. Ernst, S.V. Eremeev, E.V. Chulkov et al. // Phys. Rev. Lett. – 2012. – V. 108. – № 20. – P. 206801–206806.
3. Hasan M. Z. Colloquium: Topological Insulators / M.Z. Hasan, C.L. Kane // Rev. Mod. Phys. – 2010. – V. 82. – № 4. – P. 3045–3067.
4. Liu Z. K. Discovery of a Three-Dimensional Topological Dirac Semimetal, Na3Bi / Z.K. Liu, B. Zhou, Z.J. Wang et al. // Science. – 2014. – V.343. – № 6173. – P. 864–867.
5. Young S. M. Dirac Semimetal in Three Dimensions / S.M. Young, S. Zaheer, J.C.Y. Teo et al. // Phys. Rev. Lett. – 2012. – V. 108. – № 14. – P. 140405–140410.
6. Xu S.-Y. Observation of Fermi arc surface states in a topological metal / S.-Y. Xu, C. Liu, S.K. Kushwaha et al. // Science. – 2015. – V. 347. – № 6219. – P. 294–298.
7. Sklyadneva I.Yu. Pressure-induced topological phases of KNa_2Bi / I.Yu. Sklyadneva, I.P.Rusinov, R. Heid et al. // Scientific Reports. – 2016. – V. 6. – № 24137. – P. 1–6.
8. Kresse G. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set / G. Kresse, J. Furthmüller // Comput. Mater. Sci. – 1996. V. 6. – № 1. – P. 15–50.
9. Kresse G. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method / G. Kresse , D. Joubert // Phys. Rev. B. – 1998. – V. 59. – № 3. – P. 1758–1775.
10. Becke A.D. Density-fnnctional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior // Phys. Rev. A. – 1988. – V. 38. – № 6. – P. 3098–3100.
11. Heyd J. Hybrid functionals based on a screened Coulomb potential / J. Heyd, G.E. Scuseria, M. Ernzerhof // J. Chem. Phys. – 2003. – V. 118. – № 18. – P. 8207–8215.

ОРИЕНТАЦИОННАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЭФФЕКТА ПАМЯТИ ФОРМЫ В МОНОКРИСТАЛЛАХ СПЛАВА $Ni_{53}Mn_{25}Ga_{22}$

М.В. Пичкалёва, Е.Е. Тимофеева

Научные руководители: д.ф. - м.н., доцент Е.Ю. Панченко, д.ф. - м.н., профессор Ю.И. Чумляков

Национальный исследовательский Томский государственный университет,

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

E-mail: mariska_713@mail.ru

ORIENTATIONAL DEPENDENCE OF SHAPE MEMORY EFFECT IN $Ni_{53}Mn_{25}Ga_{22}$ SINGLE CRYSTALS

M.V. Pichkaleva, E.E. Timofeeva

Scientific Supervisors: Asist. Prof., Dr. E.Yu. Panchenko, Prof., Dr. Yu.I. Chumlyakov

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

E-mail: mariska_713@mail.ru

Abstract. *Thermoelastic martensitic transformations were investigated under cooling/heating under compressive load in <011>-, <123>-oriented NiMnGa single crystals annealed at a 1273 K for 1 hour followed by slow cooling. It is shown that the reversible strain at shape memory effect and the value of the thermal hysteresis ΔT depend on the orientation of the crystal axis: in the <011>-oriented single crystals the maximum reversible strain is ε = 4.1 %, and the maximum thermal hysteresis ΔT = 60 K, and in <123>-oriented single crystals ε = 3.2 %, and ΔT = 35 K.*

Введение. Ферромагнитные монокристаллы сплава Гейслера $Ni_{53}Mn_{25}Ga_{22}$ обладают эффектами памяти формы (ЭПФ) и сверхэластичности (СЭ), основанными на термоупругом характере мартенситных превращений (МП) [1, 2]. Эти сплавы допускают управление размерами и формой при изменении температуры и приложении нагрузки, и магнитного поля [3]. Ферромагнитные материалы с памятью формы могут найти широкое применение в авиакосмической промышленности и микросистемной технике [4, 5]. Сплавы Ni-Mn-Ga обладают высокой анизотропией ($A = 2C_{44}/(C_{11} - C_{12}) > 10$ [6], вследствие чего поликристаллы являются хрупкими, и исследования сплавов Ni-Mn-Ga сфокусированы на монокристаллах, что подразумевает изучение закономерностей МП в зависимости от ориентации кристалла. Поэтому целью данной работы является исследование ориентационной зависимости величины ЭПФ и термического гистерезиса ΔT в монокристаллах $Ni_{53}Mn_{25}Ga_{22}$.

Материалы и методы. Монокристаллы $Ni_{53}Mn_{25}Ga_{22}$ выращены методом Бриджмена. Перед испытанием образцы шлифовали и электролитически полировали для удаления поврежденного шлифовкой слоя. Монокристаллы исследовали при деформации сжатием. Размеры образцов составляли (4×4×8) мм. Закономерности МП под сжимающей нагрузкой исследованы на специально разработанной установке для измерения ЭПФ при охлаждении/нагреве под постоянной нагрузкой. Для исследования выбраны монокристаллы двух ориентаций: <011> и <123>, характеризующиеся разной величиной деформации решетки при B2($L2_1$)-$L1_0$ МП $\varepsilon_0^{<011>} = 6{,}25$ %, $\varepsilon_0^{<123>} = 4{,}77$ %. Монокристаллы исследованы после отжига при 1273 К, 1 ч с последующим медленным охлаждением.

Результаты. Экспериментально показано на монокристаллах сплава $Ni_{53}Mn_{25}Ga_{22}$, что величины обратимой и необратимой деформаций, термический гистерезис при развитии ЭПФ при охлаждении/нагреве под нагрузкой зависят от ориентации. Калориметрические исследования показывают, что в исследуемом состоянии наблюдается одностадийное МП при охлаждении/нагреве в свободном состоянии. При охлаждении ниже температуры начала МП M_s образуется самоаккомодирующая структура мартенсита, что не сопровождается изменением размеров образца. При нагреве до температуры начала обратного МП A_s начинается обратное МП, кристаллы мартенсита, сокращаясь в размерах, полностью исчезают при температуре конца обратного МП A_f. МП в свободном состоянии характеризуется широкими интервалами прямого Δ_1 и обратного Δ_2 МП 33 ÷ 50 К и малым гистерезисом 11 ÷ 18 К. Температуры и гистерезис не зависят от ориентации.

В условиях приложенных напряжений 10 ÷ 150 МПа при $T = M'_s$ происходит рост благоприятно ориентированного по отношению к внешней нагрузке варианта мартенсита, что сопровождается изменением длины образца (рис. 1). При нагреве до A'_s начинается обратное МП, и накопленная в процессе МП деформация возвращается. Также увеличиваются температуры начала и конца прямого и обратного МП. С ростом напряжений до 150 МПа увеличивается обратимая деформация до 4,1 % в <011>-монокристаллах, а в <123>-монокристаллах до 3,2 %, поскольку увеличивается объемная доля ориентированного мартенсита, а объемная доля самоаккомодирующей структуры уменьшается (рис. 2 а). Одновременно с ростом деформации при увеличении напряжений при охлаждении/нагреве увеличивается термический гистерезис ΔT (рис. 2 б). Максимальные значения гистерезиса в <011>-кристаллах $\Delta T = 60$ К, в <123>-кристаллах $\Delta T = 35$ К в исследуемом состоянии достигаются при 60 МПа и 100 МПа, соответственно, когда наблюдается максимальная обратимая деформация. Увеличение гистерезиса с ростом напряжений объясняется взаимодействием самоаккомодирующей структуры и ориентированного мартенсита. При напряжениях выше 60 МПа обратимая деформация и термический гистерезис практически не изменяются, что связано с тем, что объемная доля ориентированного мартенсита не изменяется с увеличением напряжений. Максимальная обратимая деформация ~ 4,1 % при охлаждении/нагреве под нагрузкой 60 МПа, приложенной вдоль $<011>_A$-направления, больше теоретического значения деформации превращения с учетом образования сдвойникованного варианта $L1_0$ - мартенсита $\varepsilon_{CVP} \approx 3{,}0$ % (рис. 2 а). Следовательно, в $<011>_A$-монокристаллах сплава $Ni_{53}Mn_{22}Ga_{25}$ при проявлении ЭПФ наблюдается раздвойникование кристаллов $L1_0$-мартенсита. Однако величина обратимой деформации меньше теоретического ресурса деформации превращения при полном раздвойниковании $L1_0$-мартенсита $\varepsilon_{CVP+detw} \approx 6{,}25$ %. В кристаллах с ориентацией $<123>_A$, напротив, величина обратимой деформации ~3,2 % не превышает теоретическую деформацию превращения при образовании сдвойникованного $L1_0$ - мартенсита $\varepsilon_{CVP} \approx 3{,}79$ %, и предполагается, что раздвойникование в $<123>_A$-кристаллах подавлено совсем. Косвенным доказательством отсутствия раздвойникования кристаллов $L1_0$-мартенсита под нагрузкой в $<123>_A$-кристаллах является узкий термический гистерезис меньше 35 К и малая величина необратимой деформации – менее 0,3 %. Известно, что при раздвойниковании мартенсита под нагрузкой плоскость Габитуса поворачивается относительно инвариантного положения, что сопровождается образованием дополнительных внутренних напряжений, большой энергией рассеяния, широким гистерезисом в $<011>_A$-монокристаллах до 60 К и большой величиной необратимой деформации до 0,7 % (рис. 1, 2 а).

Заключение. Экспериментально показано, что в монокристаллах $Ni_{53}Mn_{25}Ga_{22}$, отожжённых при 1273 К, 1 ч с последующим медленным охлаждением закономерности развития ЭПФ при охлаждении/нагреве под нагрузкой (величина обратимой деформации и термический гистерезис) определяются ориентацией кристалла, а именно: в <011>-монокристаллах обратимая деформация превышает теоретическое значение в 1, 4 раза, термический гистерезис $\Delta T = 60$ К, а в <123>-монокристаллах обратимая деформация практически совпадает с теоретически рассчитанной, термический гистерезис $\Delta T = 35$ К.

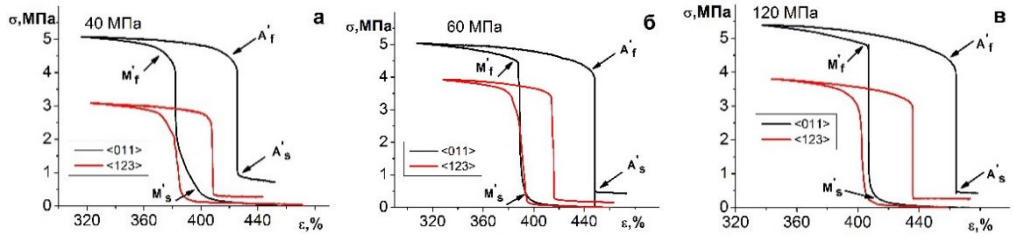


Рис. 1. Кривые ε(T) при различном уровне внешних приложенных напряжений для монокристаллов сплава $Ni_{53}Mn_{25}Ga_{22}$ при деформации сжатием: а – 40 МПа, б – 60 МПа, в – 120 МПа

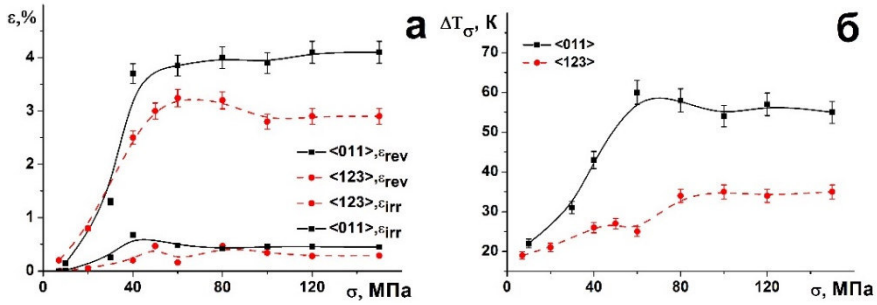


Рис. 2. Зависимости обратимой ε_{rev} и необратимой ε_{irr} деформации (а) и термического гистерезиса (б) от приложенных напряжений для монокристаллов сплава $Ni_{53}Mn_{25}Ga_{22}$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Rothl S., Gaitzsch1 U., Potschke1 M. Magneto-mechanical behaviour of textured Polycrystals of NiMnGa ferromagnetic Shape Memory Alloys. // Advanced Materials Research. – 2008. – Vol. 52. – P. 29–34.
2. Mullner, P., Chernenko V. A. Stress-induced twin rearrangement resulting in change of magnetization in a Ni–Mn–Ga ferromagnetic martensite. // Scripta Materialia. – 2003. – Vol. 49. – P. 129–133.
3. Тимофеева Е. Е Закономерности термоупругих мартенситных превращений, эффекта памяти формы и сверхэластичности в монокристаллах ферромагнитных сплавов Ni-Fe-Ga-(Co) дисс. на соискание уч. ст. канд. физ.-мат. наук/ 01.04.07. – Томск, 2012г. – 195.
4. Sozinov A., Likhachev A. A., Lanska N., Ullakko K. Giant magnetic-field-induced strain in NiMnGa seven-layered martensitic phase // Appl. Phys. Lett. – 2002. – V. 80. – p. 1746.
5. Васильев А.Н., Бучельников В.Д., Такаги Т., Ховайло В.В. Эстрин Э.И. Ферромагнетики с памятью формы // Успехи физических наук. – 2003. – Т. 173. – № 6. – С. 577–608.
6. Карпук М. М., Костюк Д. А., Кузавко Ю. А. Отражение и преломление акустических волн на границе диэлектрик-ферромагнитный сплав Гейслера // ФММ. – 2010. – Т. 110. – № 2. – С. 138–150.

ВЛИЯНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА МАРТЕНСИТНОЕ ПРЕВРАЩЕНИЕ В МОНОКРИСТАЛЛАХ СПЛАВА НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА

М.Е. Подгорный, И.В. Куксгаузен
Научные руководители: гл.н.с., д.ф.-м.н. И.В. Киреева, профессор, д.ф.-м.н. Ю.И. Чумляков
Национальный исследовательский Томский государственный университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050
E-mail: pdgmaksim@yandex.ru

EFFECT OF THE HEAT TREATMENT ON MARTENSITIC TRANSFORMATIONS IN SINGLE CRYSTALS OF IRON-BASED ALLOY

M.E. Podgorniy, I.V. Kuksgauzen
Scientific Supervisors: chief researcher, Dr. I.V. Kireeva, professor, Dr. Yu.I. Chumlaykov
National Research Tomsk State University, Russia, Tomsk Lenin str., 36, 634050
E-mail: pdgmaksim@yandex.ru

Abstract. *The shape memory effect, superelasticity and temperature range of superelasticity were investigated on [001]-oriented single crystal of FeNiCoAl(Ti+Nb+Ta) alloy, aged at temperature of T=973 K for 0,5, 3 and 5 h. The maximum value of superelasticity ε_{SE}=7,8 % was observed after aging for 0,5 h, the temperature range of its manifestations ΔT_{SE}=156K. With increasing of aging time the ε_{SE} value is reduced to 3,2 % and ΔT_{SE} is increased to 246 K.*

Введение. Известно, что в моно- и поликристаллах сплавов на основе железа наблюдается обратимая деформация превращения величиной до 13–15 % [1, 2], поэтому они представляют большой интерес для их практического применения в качестве демпферов и сенсорных материалов в авиакосмической промышленности. В настоящей работе представлены результаты по исследованию влияния термообработки на эффект памяти формы (ЭПФ) и сверхэластичность (СЭ) при деформации растяжением в [001]- монокристаллах сплава FeNiCoAl(Ti+Nb+Ta).

Материал и методика исследования. В качестве материала для исследования были выбраны [001]- монокристаллы сложнолегированного сплава $Fe_{41}Ni_{28}Co_{17}Al_{11,5}(Ti+Nb+Ta)_{2,5}$ (ат. %). Выбор ориентации монокристаллов определялся максимальным теоретическим значением деформации решетки ε_0 при деформации растяжением в ориентации [001]: ε_0=8,7% при γ-α'–мартенситном превращении (МП) [1]. Испытания проводили после предварительной термообработки: гомогенизация 1553 К, 10 ч, отжиг при Т=1553 К, 1,5 ч с последующей закалкой в воду и старении при Т=973 К в течение 0,5 ч, 3 ч и 5 ч в атмосфере гелия. Механические свойства исследовали на испытательной машине типа «Поляни» в интервале температур от 77 до 523 К. ЭПФ под нагрузкой исследовали на специально сконструированной установке для термоциклирования при постоянной нагрузке со скоростью охлаждения/нагрева 20 К/мин в температурном интервале от 77 до 373 К.

Результаты и их обсуждения. На рис. 1 представлены результаты исследований температурной зависимости критических напряжений $\sigma_{0,1}$ в температурном интервале Т=77–573 К для состаренных при Т=973 К в течение t=0,5, 3 и 5ч [001]- монокристаллов сплава FeNiCoAl(Ti+Nb+Ta) при деформации

растяжением. При всех временах старения зависимость $\sigma_{0.1}$(T) имеет вид характерный для сплавов, испытывающих МП под нагрузкой, и состоит из двух стадий. На первой стадии 77 К<T<M_d (M_d – температура, при которой напряжения высокотемпературной фазы оказываются равными напряжению, необходимому для образования мартенсита под нагрузкой) напряжения $\sigma_{0,1}$ растут с увеличением температуры испытания. Такая зависимость $\sigma_{0,1}$(T) описывается соотношением Клайперона-Клаузиуса [3]:

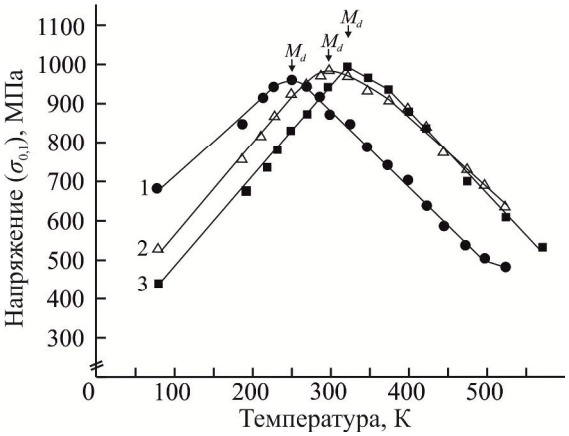


Рис.1. Температурная зависимость критических напряжений $\sigma_{0,1}$ для состаренных при T=973 К 0,5 ч (кривая 1), 3 ч (кривая 2) и 5 ч (кривая 3) [001]-монокристаллов сплава FeNiCoAl(Ti+Nb+Ta) при растяжении

$$\frac{d\sigma_{0,1}}{dT} = \frac{\Delta H}{\varepsilon_0 T_0},$$

где ΔH – изменение энтальпии, T_0 – температуры химического равновесия γ- и α'-фаз. При T>M_d наблюдается вторая стадия, характерная для ГЦК-материалов, в которой наблюдается падение $\sigma_{0,1}$ с ростом температур.

Анализ температурной зависимости $\sigma_{0,1}$(T) показывает, что с увеличением времени старения температура начала прямого МП T(M_s), температура T(M_d) и уровень напряжений $\sigma_{0,1}$(M_d) увеличиваются (табл. 1). Из рис.1 видно, что напряжения $\sigma_{0,1}$ при одной температуре испытания, например при T=77 К, уменьшаются с увеличением времени старения и, следовательно, температура M_s повышается. При T>M_d напряжения $\sigma_{0,1}$ после старения в течение 3-5 ч выше на 110-130МПа, относительно старения t=0,5 ч. Рост напряжений высокотемпературной фазы и T(M_d) приводит к увеличению температурного интервала развития МП под нагрузкой, а следовательно и температурного интервала проявления СЭ $\Delta T_{СЭ}$ (табл. 1).

Таблица 1

Механические и функциональные свойства [001]-монокристаллов FeNiCoAl(Ti+Nb+Ta), состаренных при T=973 К

Термообработка	T(M_d), К	$\sigma_{0,1}$(M_d), МПа	$\varepsilon_{ЭПФ}^{макс}$, %	$\varepsilon_{СЭ}^{макс}$, %	$T_{СЭ1}$, К	$T_{СЭ2}$, К	$\Delta T_{СЭ}$, К
973 К, 0,5 ч	250	961	-	7,8	≤77	233	156
973 К, 3 ч	297	987	1,2	3,4	≤77	283	206
973 К, 5 ч	323	1002	1,7	3,2	≤77	323	246

На рис. 2 представлены результаты исследования ЭПФ при охлаждении/нагреве под постоянной внешней растягивающей нагрузкой $\sigma_{вн}$ для состаренных при T=973 К, t=0,5, 3 и 5ч [001]- монокристаллов сплава FeNiCoAl(Ti+Nb+Ta). Видно, что с увеличением времени старения напряжения, необходимые для появления первой петли ЭПФ, уменьшаются, что коррелирует с повышением температуры M_s (рис. 1). При времени старения t=0,5 ч при охлаждении под нагрузкой $\sigma_{вн}$=775 МПа (рис.2, а) наблюдается изменение размеров образца на 0,9 %, однако при нагреве до T=373 К деформация не возвращается, следовательно ЭПФ не реализуется. Отсутствие ЭПФ при данном времени старения связано, во-первых, с не достижением температур обратного МП из-за широкого температурного гистерезиса превращения

ΔT, и во-вторых, с низкими прочностными свойствами высокотемпературной фазы. При увеличении времени старения до 3-5 ч напряжения высокотемпературной фазы возрастают, и при изучении ЭПФ при охлаждении/нагреве под нагрузкой наблюдается одностадийное γ-α'–МП, которое является полностью обратимым и характеризуется узким температурным гистерезисом ΔT=75 К, а следовательно наблюдается ЭПФ (рис. 2, б, в). После старения в течение t=3 ч (рис. 2, б) $\varepsilon_{ЭПФ}$=0,6 % реализуется при напряжениях $\sigma_{вн}$=600 МПа, а при $\sigma_{вн}$=650 МПа достигается максимальная величина обратимой деформации, равная 1,2 %. После старения t=5ч (рис.2, в) величина ЭПФ при $\sigma_{вн}$=650 МПа увеличивается до 1,7 %, по сравнению со старением в течение 3 ч. Значения $\varepsilon_{ЭПФ}$ для всех времен старения не достигают теоретической величины деформации решетки ε_0 при γ-α' МП для соответствующей ориентации.

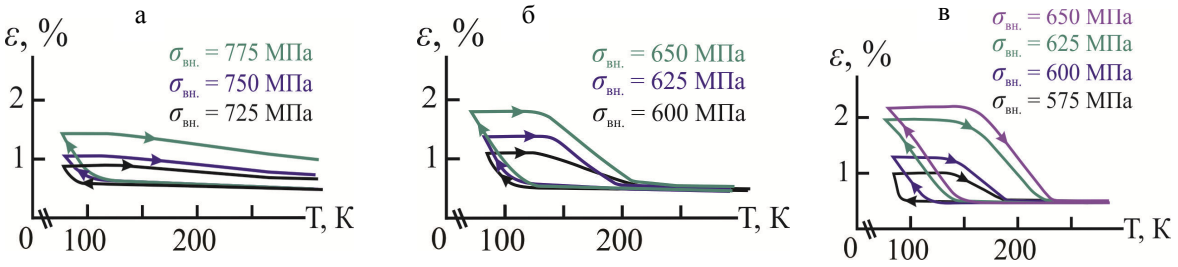


Рис.2. ε(T) кривые, полученные при охлаждении/нагреве под постоянной растягивающей нагрузкой для состаренных при T=973 К в течение а) 0,5 ч, б) 3 ч и в) 5 ч [001]-монокристаллов FeNiCoAl(Ti+Nb+Ta)

Исследования СЭ в [001]-монокристаллах сплава FeNiCoAl(Ti+Nb+Ta), состаренных при T=973 К, t=0,5, 3 и 5 ч показали, что величина СЭ $\varepsilon_{СЭ}$ и ее температурный интервал $\Delta T_{СЭ}$ зависят от времени старения (табл. 1). Из экспериментов по термоциклированию при температуре T=77 К было установлено, что величина $\varepsilon_{СЭ}$ при времени старения t=0,5 ч равна 7,8 %, что близко к теоретическому значению ε_0. С увеличением времени старения величина СЭ уменьшается до 3,4 % при t=3 ч и до 3,2 % при t=5 ч, что связано с уменьшением объема материала, который испытывает МП под нагрузки, за счет увеличения объёмной доли частиц γ'-фазы. СЭ после старения 0,5 ч наблюдается от $T_{СЭ1}$=77 К до $T_{СЭ2}$=233 К. После старения в течение 5 ч последняя температура наблюдения СЭ $T_{СЭ2}$ возрастает до 323 К, так что интервал СЭ увеличивается до $\Delta T_{СЭ}$=246 К, по сравнению с $\Delta T_{СЭ}$=156 К при времени старения 0,5 ч.

Заключение. Итак, экспериментально на [001]- монокристаллах сплава FeNiCoAl(Ti+Nb+Ta) при деформации растяжением было установлено, что изменяя время старения при одной и той же температуре можно управлять уровнем напряжений высокотемпературной фазы, температурами T(M_d) и T(M_s), величиной ЭПФ и СЭ, а также температурным интервалом СЭ.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 14-29-00012.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Tanaka Y., Himuro Y., Kainuma R. et.al. Ferrous polycrystalline shape-memory alloy showing huge superelasticity // Science. – 2010. – Vol. 327. – P. 1488–1490.
2. Чумляков Ю.И., Киреева И.В., Поклонов В.В. и др. Эффект памяти формы и сверхэластичность в монокристаллах ферромагнитного сплава FeNiCoAlTi // Письма в ЖТФ. – 2014. – Т. 40, Вып. 17. – С. 47–53.
3. Otsuka K., Wayman C.M. Shape memory materials. – Cambrige: Cambrige University Press, 1998. – 284 p.

ВЛИЯНИЕ РАЗМЕРА ДИСПЕРСНЫХ ЧАСТИЦ γ'-ФАЗЫ НА СВЕРХЭЛАСТИЧНОСТЬ В МОНОКРИСТАЛЛАХ СПЛАВА FeNiCoAlTi

В.В. Поклонов, С.Э. Лямкин

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. Ю.И. Чумляков, гл.н.с., д.ф.-м.н. И.В. Киреева

Национальный исследовательский Томский государственный университет,

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

E-mail: poklonov_vyacheslav@mail.ru

THE EFFECT OF SIZE OF γ' PHASE DISPERSED PARTICLES ON SUPERELASTICITY IN FeNiCoAlTi SINGLE CRYSTALS

V.V. Poklonov, S.E. Lyamkin

Scientific Supervisors: professor, Dr. Yu.I. Chumlaykov, chief researcher, Dr. I.V. Kireeva,

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

E-mail: poklonov_vyacheslav@mail.ru

Abstract. *In [001] single crystals of FeNiCoAlTi alloy, it is shown that precipitation of particles of the ordered γ'-phase in the course of aging at T=873 K for 4 h and T=973 K for 5, 7 h results in the development of superelasticity. It is experimentally found that variation of size of γ'-phase dispersed particles allows controlling mechanical and functional properties.*

Введение. Авторами работ [1–3] показано, что в неупорядоченных сплавах на основе железа FeNiCoTi условия для термоупругих мартенситных превращений (МП) создаются за счет выделения наноразмерных упорядоченных частиц, которые сами не испытывают МП. Известно, что с помощью вариации размера и объемной доли дисперсных частиц γ'-фазы можно изменять не только тип структуры мартенсита, но и уровень напряжений пластического течения аустенитной фазы, температуры МП и температурный интервал сверхэластичности (СЭ) [1–3]. Целью настоящей работы является исследование влияния размера дисперсных частиц γ'-фазы на развитие термоупругого γ–α'-МП под нагрузкой и СЭ в [001]-монокристаллах сплава на основе железа Fe–28%Ni–17%Co–11,5%Al–2,5%Ti (ат.%).

Материалы и методы исследования. Монокристаллы сплава Fe–28%Ni–17%Co–11,5%Al–2,5%Ti (ат.%) выращивали в среде инертного газа методом Бриджмена. Ориентацию кристаллов определяли на дифрактометре ДРОН-3. Образцы для растяжения вдоль [001]-направления вырезали на электроискровом станке. Выбор ориентации [001] обусловлен максимальным теоретическим значением величины деформации решетки ε_0=8,7% при деформации растяжением [1]. Гомогенизацию образцов проводили в атмосфере инертного газа Не при температуре 1550 К, 20 часов. После закалки от 1550 К, 1 час в воду монокристаллы при комнатной температуре находились в однофазном состоянии. Для выделения наноразмерных частиц γ'-фазы проводили старение в атмосфере инертного газа Не при температурах 873 К, 4 часа (кристаллы А), а также при температуре 973 К, 5 часов (кристаллы В) и 7 часов (кристаллы С). В кристаллах А размер частиц <5 нм, в кристаллах В 7,5–9,5 нм, а в кристаллах С частицы имеют размер 10–14 нм. Механические свойства исследовали на испытательной машинах типа «Поляни» и Instron 5969 при скорости деформации $\dot{\varepsilon} = 4 \cdot 10^{-4}$ с$^{-1}$ в интервале температур от 77 до 525 К.

Результаты. На рис.1 представлены результаты исследования температурной зависимости критических напряжений при деформации растяжением. Видно, что в однофазном состоянии кривая $\sigma_{0.1}(T)$ имеет характерную для ГЦК-сплавов, не испытывающих МП, температурную зависимость – с увеличением температуры испытания $\sigma_{0.1}$ уменьшаются. При старении наблюдается изменение температурной зависимости $\sigma_{0.1}(T)$ и температурная зависимость имеет вид, который наблюдается в сплавах, испытывающих МП под нагрузкой. На кривых $\sigma_{0.1}(T)$ в температурном интервале T=77–525 К наблюдаются две стадии. На первой стадии при 77 К<T<M_d (M_d – температура, при которой напряжения образования мартенсита под нагрузкой равны напряжениям течения высокотемпературной фазы и соответствует максимальному значению σ) происходит линейное увеличение $\sigma_{0.1}$ с ростом температуры испытания, которое описывается соотношением Клапейрона – Клаузиуса:

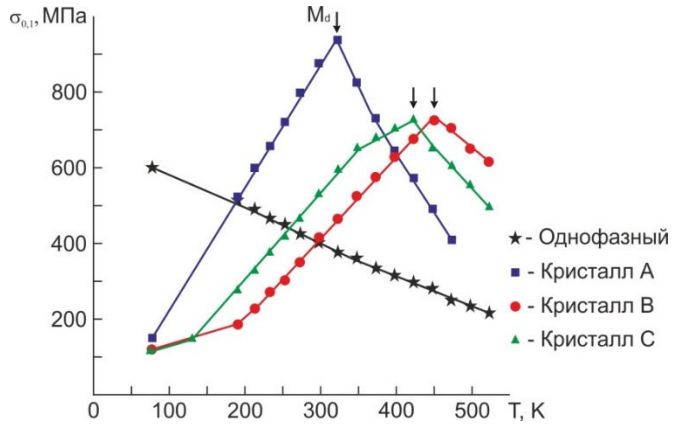


Рис. 1. Температурная зависимость критических напряжений $\sigma_{0,1}$ для [001] монокристаллов сплава FeNiCoAlTi при деформации растяжением

$$\frac{d\sigma_{0,1}}{dT} = -\frac{\Delta H}{\varepsilon_0 T_0} \quad (1)$$

Здесь ΔH – изменение энтальпии при γ–α'-МП; ε_0 – деформация превращения; T_0 – температура химического равновесия фаз. При T>M_d наблюдается вторая стадия, связанная с деформацией высокотемпературной фазы, на которой напряжения $\sigma_{0,1}$ падают с ростом температуры и данная зависимость характерна для материалов с ГЦК решеткой при деформации скольжением, и данных кристаллов в однофазном состоянии. Анализ температурной зависимости критических напряжений показал, что изменение размера дисперсных частиц γ'-фазы влияет, во-первых, на величину α=$d\sigma_{0,1}/dT$: в кристаллах A α_1=3,5 МПа/К, в кристаллах B α_2=2,25 МПа/К, в кристаллах С α_3=2,3 МПа/К. Во-вторых, M_d, уровень напряжений $\sigma_{0,1}(M_d)$ и температура начала прямого МП M_S зависят от времени старения. С увеличением размера дисперсных частиц γ'-фазы температуры M_S и M_d повышаются, а напряжения $\sigma_{0,1}(M_d)$ уменьшаются: в кристаллах A M_S<77 К, M_d=320 К и $\sigma_{0,1}(M_d)$=920 МПа, в кристаллах B M_S<77 К, M_d=450 К и $\sigma_{0,1}(M_d)$=720 МПа, а в кристаллах C M_S=97 К, M_d=420 К и $\sigma_{0,1}(M_d)$=720 МПа.

Экспериментально установлено, что при деформации растяжением [001]-монокристаллы обладают СЭ, величина и температурный интервал проявления которой зависят от размера дисперсных частиц γ'-фазы: в кристаллах А СЭ наблюдается в температурном интервале ΔT=60 К, в кристаллах В ΔT=160 К, а в кристаллах С ΔT=220 К. На рис. 2 представлены результаты исследования максимальной

величины СЭ. В кристаллах А $\varepsilon_{СЭ}$=11% и эта величина оказывается больше величины деформации решетки ε_0=8,7% для кристаллов данной ориентации при γ–α'-МП. В кристаллах В и С максимальная величина СЭ равна 8,7% и эта величина оказывается равной теоретической величине деформации решетки. В работе [3] на монокристаллах FeNiCoAlNb с малым размере дисперсных частиц γ'-фазы <3 нм наблюдали превышение величины обратимой деформации теоретического значения ε_0, что авторы связывают с <011>{110} упругим двойникованием, развивающимся в α'-мартенсите. При увеличении размера частиц γ'-фазы происходит подавление упругого двойникования. Результат, полученный на кристалле А, где $\varepsilon_{СЭ}$, как и в монокристаллах FeNiCoAlNb, превышает ε_0, подтверждает общность этого явления.

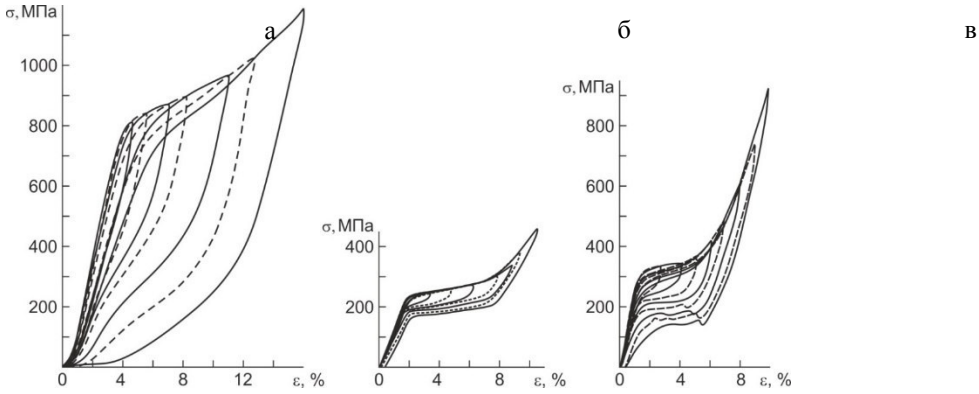


Рис. 2. Кривые «напряжение – деформация» при растяжении в [001]-монокристаллах сплава FeNiCoAlTi: а – кристалл А при температуре испытания 250 К, б – кристалл В при температуре испытания 223 К, в – кристалл С при температуре испытания 195 К

Заключение. На монокристаллах сплава FeNiCoAlTi при деформации растяжением установлено, что изменением размера дисперсных частиц γ'-фазы можно управлять температурами МП, уровнем напряжений высокотемпературной фазы, величиной обратимой деформации и интервалом проявления СЭ.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ №14-29-00012.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Sehitoglu H., Zhang X.Y., Kotil T., Canadic D., Chumlyakov Y.I., Maier H.J. Shape memory behavior of FeNiCoTi single and polycrystals // Metallurgical and Materials Transactions A. – 2002. – V. 33A. – P. 3661–3672.
2. Chumlyakov Y.I., Kireeva I.V., Poklonov V.V., Pobedennaya Z.V., Karaman I. The shape-memory effect and superelasticity in single-crystal ferromagnetic alloy FeNiCoAlTi // Technical Physics Letters. – 2014. – V. 40. – N. 9. – P. 747–750.
3. Chumlyakov Y.I., Kireeva I.V., Kutz O.A., Turabi A.S., Karaca H.E., Karaman I. Unusual reversible twinning modes and giant superelastic strains in FeNiCoAlNb single crystals // Scripta Materialia. – 2016. – V. 119. – P. 43–46.

СТРУКТУРА КОМПОЗИЦИОННЫХ ЛИГАТУР, ПОЛУЧЕННЫХ СВС МЕТОДОМ

В.В. Промахов[1,2], А.Е. Матвеев[2], И.А. Жуков[1,2]

Научные руководители: д.ф.-м.н. А.Б. Ворожцов, д.ф.-м.н. А.С. Жуков

[1]Институт проблем химико-энергетических технологий СО РАН,

Россия, г. Бийск, ул. Социалистическая, 1, 659322

[2]Национальный исследовательский Томский государственный университет,

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

E-mail: vvpromakhov@mail.ru

COMPOSITE STRUCTURE OF MASTER-ALLOY OBTAINED BY SHS

V.V. Promakhov[1,2], A.E. Matveev[2], I.A. Zhukov[1,2]

Scientific Supervisors: Dr. A.B. Vorozhtsov, Dr. A.S. Zhukov

[1]Institute for Problems of Chemical & Energetic Technologies SB RAS, Russia, Altai region,

Biysk, Socialisticheskaya str., 1, 659322

[2]Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050

E-mail: vvpromakhov@mail.ru

Abstract. *The aim of the work is the synthesis and study of composite structures of master-alloy for aluminum alloys obtained by self-propagated high-temperature synthesis. The data on the composition of the mixture of powders for synthesis were obtained. Established the parameters SHS process for master-alloy with an average particle size of titanium diboride about 0,6 mkm.*

Введение. Необходимость проведения работ обусловлена потребностью современного машиностроения в композиционных материалах, способных удовлетворить требованиям новой техники, для которой характерно ужесточение условий эксплуатации: повышение нагрузок, скоростей, температур, агрессивности сред, уменьшение веса и т.д.

Согласно проведенному анализу, при получении композиционных сплавов на основе алюминия, особое внимание следует уделять способу синтеза лигатур и выбору частиц, используемых в качестве упрочняющей фазы [1]. Для получения богатых лигатур с контролируемым фазовым составом был выбран самораспространяющийся высокотемпературный синтез (СВС). Технология СВС позволяет получать неорганические соединения различных классов (карбиды, бориды, нитриды, гидриды, силициды, оксиды, интерметаллиды и фосфиды), как в виде индивидуальных соединений, так и более сложных по составу. Применительно к легким сплавам, СВС лигатуры, состоящие из отдельных кристаллитов целевой тугоплавкой фазы со средним размером от 0,5 до 3 мкм, имеют очевидную перспективу. Возможность получать частицы тугоплавких соединений, разделенных тонким слоем интерметаллидов, растворяющихся в процессе введение лигатуры в расплав, принципиально исключает их агломерацию. Получение композиции такой структуры возможно только с применением СВС [2].

Материалы и методы исследований. Для проведения экспериментальных исследований закономерностей структурообразования в системе Al-Ti-B в качестве исходных компонентов шихт были взяты порошки алюминия (марки АСД-0 с размером частиц 80-100 мкм), бора аморфного (марки Б99-А чистотой 99 % со средним размером частиц 650 нм) и титана (марки ПТОМ-1 с размером частиц 0-40 мкм).

Предварительные исследования показали, что дисперсность порошка алюминия марки АСД-0 (80-100 мкм) либо марки АСД-6 (15-20 мкм) не влияет на кинетику горения системы Al-Ti-B [3]. Однако с экономической и технологической точек зрения более целесообразно использовать порошок алюминия марки АСД-0.

Содержание алюминия в смеси варьировалось от 10 до 60 масс %. Прессование подготовленной шихты проводили в стальной пресс-форме с использованием лабораторного пресса. Оптимальное давление прессования определялось путем проведения специальных экспериментов по влиянию плотности образцов на скорость горения. Плотность образцов, а, следовательно, и скорость их горения определяется исходными характеристиками используемых шихтовых материалов.

После синтеза экспериментальных образцов проводили исследования закономерности формирования структуры продуктов реакции с использованием сканирующего электронного микроскопа Philips SEM 515. Для проведения структурных исследований образцы подвергались полировке с применением алмазных паст различной дисперсности до появления зеркальной поверхности. Значение ускоряющего напряжения, тока первичного электронного пучка, контраст изображения и угол наклона образца относительно электронного пучка в каждом случае определялись качеством получаемых изображений.

Непосредственно технологический процесс характеризуется следующими этапами. Стадия синтеза в режиме горения начинается с операции установки реакционного тигля с высушенной экзотермической шихтой в рабочее пространство реактора. Электроды для зажигания приводятся в контакт с поверхностью экзотермической шихты. Далее рабочее пространство реактора герметизируется, вакуумированием из него удаляется воздух и заполняется рабочим газом (аргоном).

Результаты и их обсуждение. Установлено, что в структуре материалов наблюдались зерна диборида титана (TiB_2) формой близкой к сферической, рис.1. Зерна диборида титана разделены интерметаллидной матрицей TiAl. Выявлено, что независимо от содержания алюминия в исходной шихте, фазовый состав продуктов реакции практически не изменялся. По-видимому, такая закономерность обусловлена термодинамической природой реакций формообразования и большим сродством титана к бору. Литературные данные свидетельствуют о том, что при изменении стехиометрии в системе Ti-B можно контролировать фазовый состав конечных продуктов реакции и получать интерметаллидную матрицу из фаз Al_3Ti, Ti_3Al и др. [2]. Это может быть весьма актуальным направлением при контролируемом синтезе композитов и лигатур. В частности, при использовании таких материалов в качестве жаропрочных, либо бронезащитных. В случае рассмотрения варианта их использования в качестве лигатур, наличие фазы AlTi является положительным фактором, поскольку имеются литературные данные о том, что лигатуры AlTi используются, как отдельный класс лигатур в цветной металлургии и не вносят [4].

Установлено, что при меньшем содержании алюминия в шихте размер зерна диборида титана составил 3,7 мкм. При максимальном содержании алюминия в шихте средний размер зерна TiB_2 уменьшился до 0,6-

0,9. При этом общее содержание частиц диборида титана увеличивается (т.е. лигатура становиться более концентрированной). Таким образом, добавление алюминия может быть одним из эффективных методов управления размером частиц фазы TiB_2.

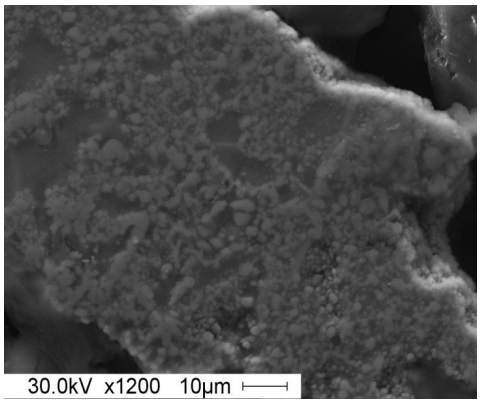


Рис.1 Структура лигатуры (70%(Ti +2B)+30%Al) после синтеза

Заключение. В качестве базовых композиций для проведения исследований о влиянии состава лигатуры на структуру и физико-механические свойства сплавов на основе алюминия необходимо использовать составы с содержанием алюминия в шихте от 30 до 50 масс. %. Нижний предел содержания алюминия обусловлен относительно бо́льшим размером зерна диборида титана, формирующегося в процессе синтеза, что снижает эффективность лигатуры. Верхний предел содержания алюминия в шихте связан с технологическими условиями СВС (составы с содержанием порошка алюминия более 55 масс. % требуют использования дополнительных поджигающих элементов для инициирования горения).

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-38-60028 мол_а_дк и при финансовой поддержке гранта Президента МК-837.2017.8 договор № 14.Y30.17.837-МК.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Vorozhtsov S. et al. Theoretical and Experimental Investigations of the Process of Vibration Treatment of Liquid Metals Containing Nanoparticles //JOM. – 2016. – Т. 68. – №. 12. – С. 3094-3100.
2. Жуков И. А. и др. Самораспространяющийся высокотемпературный синтез боридов Al и Ti //ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ. ФИЗИКА. – 2016. – Т. 59. – №. 8. – С. 177-178.
3. Промахов В.В., Жуков И.А., Ворожцов С.А., Зиатдинов М.Х., Дубкова Я.А. Закономерности безгазового горения системы Al-Ti-B // Тезисы XII Международной конференции «HEMs-2016». 7-9 сентября 2016 года (г.Томск, Россия). –Томск: Издательский дом Томского государственного университета, 2016. – С. 135.
4. Xiangfa L. et al. The Morphologies of TiAl_3 in AlTi Master Alloys and Their Effect on Refinement Efficiency [J] //HOT WORKING TECHNOLOGY. – 1997. – Т. 1. – С. 002.

ОСОБЕННОСТИ РЕЛАКСАЦИИ ЗЕРЕННОЙ И ДЕФЕКТНОЙ СТРУКТУРЫ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОГО СПЛАВА V-Cr-ZrO_2

В.Л. Радишевский[1], И.В. Смирнов[1, 2], К.В. Гриняев[1, 2]

Научный руководитель: доцент, д.ф.-м.н. И.А. Дитенберг

[1] Национальный исследовательский 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: rvl@myttk.ru

FEATURES RELAXATION GRAIN AND DEFECT STRUCTURE OF NANOSTRUCTURED ALLOY V-Cr-ZrO_2 ALLOY

V.L. Radishevskiy[1], I.V. Smirnov[1, 2], K.V. Grinyaev[1, 2]

Scientific Supervisor: docent, Dr. I.A. Ditenberg

[1] National Research Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenina pr., 36, 634050

[2] Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Russia, Tomsk, Akademicheskiy pr., 2/4, 634055

E-mail: rvl@myttk.ru

Abstract. *The study of parameters of the defect structure near the recrystallization temperature of the dispersion-strengthened alloy V–Cr–ZrO_2 after deformation by torsion under pressure is presented.*

Введение. Формируемые в металлических материалах методами больших пластических деформаций (БПД) субмикрокристаллические и наноструктурные состояния характеризуются высокой плотностью дефектов кристаллического строения, оказывающих влияние на комплекс физико-механических свойств [1]. Изучение стабильности указанных структурных состояний в условиях деформационного и/или термического воздействия по-прежнему остается актуальной задачей.

Целью настоящей работы является исследование особенностей зеренной и дефектной структуры наноструктурированного дисперсно-упрочненного ванадиевого сплава после отжигов вблизи температуры рекристаллизации.

Материалы и методы исследования. Исследование проведено на дисперсно-упрочненном сплаве V–8,75%Cr–1,17%Zr–0,14%W–0,01%C–0,02%O–0,01%N (вес. %) после БПД кручением на наковальнях Бриджмена (N = 1, P = 7 ГПа). После деформации выполнены часовые отжиги в вакуумной печи типа СШВЛ при температурах 700 и 800 °C. Структурные исследования осуществлены с использованием просвечивающей электронной микроскопии на приборе Philips CM30 (300 кВ). Тонкие фольги подготовлены по методике [2] в сечениях, нормальных плоскости наковален (ПН). Аттестация дефектной структуры проведена с использованием методики темнопольного анализа дискретных и непрерывных разориентировок [3].

Результаты. Структурная аттестация изучаемого сплава после деформации кручением под давлением подробно проведена в работе [2]. На рисунке 1 а представлено светлопольное изображение микроструктуры. Показано, что субмикрокристаллическое состояние характеризуется сильной анизотропией зеренной структуры: размеры зерен в направлениях параллельных ПН находятся в

интервале 70–700 нм, в то время как в направлении оси кручения (ОК) их размеры достигают 50–200 нм.

Проведенный в настоящей работе отжиг при T = 700 °C не оказал какого-либо влияния на зеренную и дефектную структуру изучаемого материала, при этом сохраняется аналогичное представленному на рисунке 1 а анизотропное субмикрокристаллическое состояние. В тоже время после повышения температуры отжига до 800 °C (рис. 1 б) на фоне анизотропной микроструктуры появляются почти равноосные зерна размерами от 50 до 500 нм.

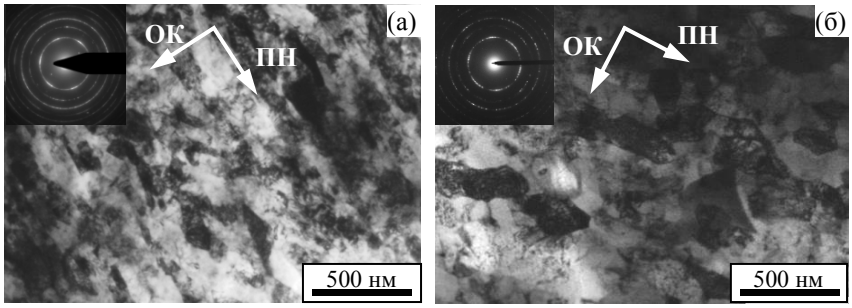


Рис. 1. Микроструктура сплава V-Cr-ZrO_2 после большой пластической деформации кручением на наковальнях Бриджмена (а) [2] и отжига при T = 800 °C (б).

На рисунке 2 представлены гистограммы распределения зерен по размерам изучаемого сплава после деформации (рис. 2 а, б) и последующего отжига при T = 800 °C (рис. 2 в, г). Как видно (рис. 2), после отжига при 800 °C размеры зерен и характер их распределения в направлениях параллельных и перпендикулярных ПН сопоставимы.

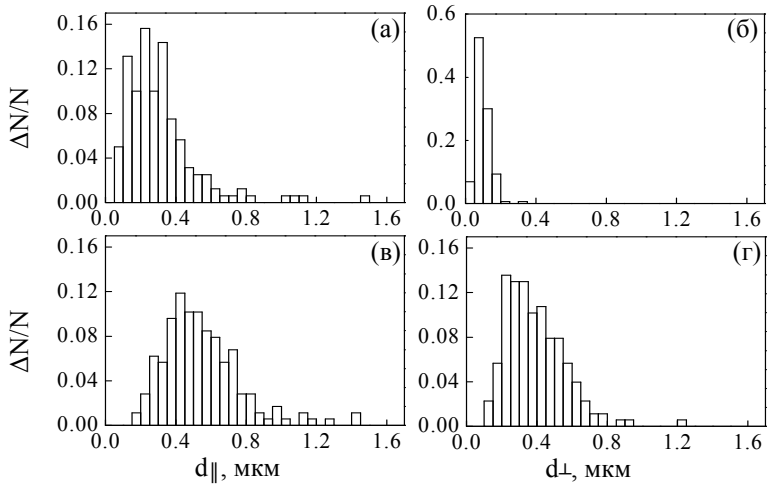


Рис. 2. Гистограммы распределения зерен по размерам сплава V–Cr–ZrO_2 после деформации (а, б) и отжига при температуре 800 °C (в, г). Размеры $d_{\parallel}$ вдоль ПН (а, в), размеры $d_{\perp}$ вдоль ОК (б, г).

Дефектная структура субмикрокристаллического состояния после деформации характеризуется кривизной кристаллической решетки (χ_{ij}) от 10 до 40 град/мкм [2], соответствующие оценки величин локальных внутренних напряжений составляют $\sigma_{лок} \approx E/75–E/45$.

На рисунке 3 а представлен пример темнопольного анализа особенностей тонкой дефектной структуры после отжига при 800 °C. Установлено, что при наклоне гониометра на угол $\Delta\varphi \approx 1{,}5°$, контур экстинкции перемещается на расстояние $\Delta r \approx 180$ нм. В соответствие с [3], компонента кривизны

кристаллической решетки χ_{21} может быть определена по формуле $\chi_{21} \approx \Delta\varphi \cdot \sin(\beta)/(\Delta r)$ (рис. 3 б). С учетом угла между вектором действующего отражения g типа <110> и направлением проекции оси наклона гониометра (ПОН) $\beta = 87{,}5°$, компонента кривизны кристаллической решетки χ_{21} достигает ≈ 8 град/мкм. В случае если кривизна обусловлена только изгибом фольги, ширина контура $L_{теор} \approx \gamma_0/\chi_{21} \approx 60$ нм, где $\gamma_0 \approx 0{,}5°$ – угловой размер дифракционного максимума в бездефектном кристалле. Однако экспериментальное значение $L_{экс} \approx 100$ нм. Таким образом, почти 1.5–кратное уширение контура экстинкции свидетельствует о наличии структурной кривизны кристаллической решетки, а не связано с изгибом или короблением тонкой фольги.

Согласно [3], по формуле $\sigma_{лок} \approx \chi_{ij} \cdot E \cdot \Delta h/2$ (E – модуль Юнга, Δh – характерные размеры зоны высокой кривизны кристалла) из экспериментальных данных о χ_{ij} и Δh можно оценить величину локальных внутренних напряжений. Учитывая, что $\chi_{ij} \approx 8$ град/мкм, а Δh ≈ 0,18 мкм, максимальные значения $\sigma_{лок}$ не превышают E/80. Таким образом, представленный результат свидетельствует о начале интенсивных процессов релаксации дефектной структуры при T = 800 °C.

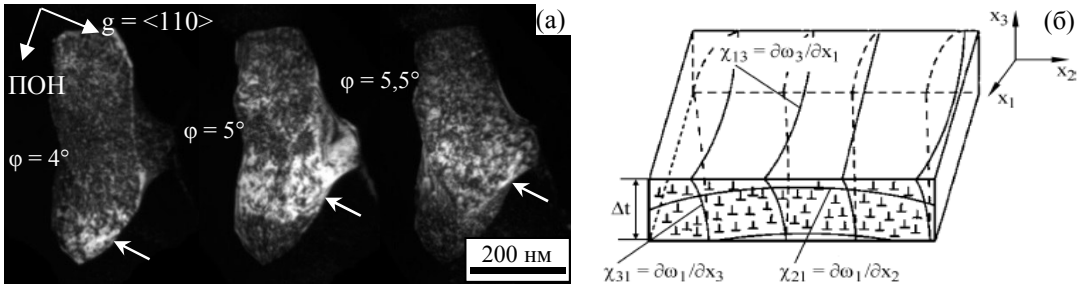


Рис. 3. Пример анализа непрерывных разориентировок изучаемого сплава после отжига при T=800°C (а); схема структурного состояния с кривизной кристаллической решетки (б) [3].

Выводы. Установлено, что в наноструктурированном дисперсно-упрочненном сплаве V–Cr–ZrO_2 при температуре 800 °C активизируются процессы релаксации, которые сопровождаются ростом зерен, существенным снижении значений кривизны кристаллической решетки и величин локальных внутренних напряжений.

Исследования проведены с использованием оборудования Томского регионального центра коллективного пользования НИ ТГУ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Валиев Р.З, Александров И.В. Объемные наноструктурные металлические системы – М.: ИКЦ «Академкнига», 2007. – 398с.
2. Smirnov I.V., Ditenberg I.A., Grinyaev K.V., Radishevsky V.L. Features of formation of nanocrystalline state in internal-oxidized V-Cr-Zr-W and V-Mo-Zr system alloys during deformation by torsion under pressure // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – 2016. – V. 116. – № 1. – I. 012037. – P. 1–5.
3. Тюменцев А.Н., Дитенберг И.А., Коротаев А.Д., Денисов К.И. Эволюция кривизны кристаллической решетки в металлических материалах на мезо и наноструктурном уровнях пластической деформации // Физическая мезомеханика. – 2013. – Т. 16. – №. 3.

ИЗМЕНЕНИЕ ПОВЕРХНОСТИ ВОЛЬФРАМА ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ВОДОРОДНОЙ ПЛАЗМОЙ

Б.К. Рахадилов

Научный руководитель: профессор, д.ф-м.н. М.К. Скаков

Национальный ядерный центр Республики Казахстан,

Казахстан, г. Курчатов, ул. Красноармейская 2, 071100

E-mail.ru: rakhadilovb@mail.ru

CHANGES OF THE TUNGSTEN SURFACE AT THE HYDROGEN PLASMA IRRADIATION

B.K. Rakhadilov

Scientific Supervisor: Prof., Dr. M.K. Skakov

National Nuclear Center of the Republic of Kazakhstan,

Kazakhstan, Kurchatov city, Krasnoarmeyskaya st. 2, 071100

E-mail.ru: rakhadilovb@mail.ru

Abstract. *In this work has been investigated changes of the structure and the erosion of the tungsten surface at the hydrogen plasma irradiation. It was shown that at the irradiation observed changes of the surface as the development of the relief as a result of the nonuniform surface etch. Metallographic analysis showed after irradiation of the tungsten samples at T = 1000 °C and 1500 °C degree of development of the relief lower compared with the sample of tungsten irradiated at T = 700 °C. However, on the samples observed the fine cracks, thus with the growth of temperature the size and cracking to increases. It has been determined after the hydrogen plasma irradiation the surface roughness is changed depending on the irradiation temperature. It is shown that with the growth of the target temperature and the ion energy is increased degree of surface erosion. Noticeable erosion of tungsten due to irradiation of the plasma flow, which simulating of the stationary mode plasma occurs only at relatively high temperatures of the target.*

Введение. Одной из ключевых задач в создании термоядерного реактора на основе токамака является выбор обращенных к плазме материалов, которые должны противостоять как стационарному плазменно-тепловому воздействию, так и интенсивному импульсному [1]. В качестве наиболее подходящих материалов для облицовки дивертора Международного термоядерного экспериментального реактора ИТЭР рассматривают углеграфитовые материалы и вольфрам [2, 3].

Процессы повреждения поверхности материалов при воздействии потоков плазмы определяются, прежде всего, теплофизическими свойствами самого материала, а именно: коэффициентом температуропроводности, температурами плавления и кипения. Однако существуют и значительные различия, вызываемые широким фронтом воздействия, завихрениями потока на неровностях и выступах облучаемых деталей и узлов, а также эффектом внедрения ионов плазмы в материал. Все это приводит к эрозию, образованию специфических поверхностных структур и модифицированного приповерхностного слоя [4]. При этом, характер эрозии материалов существенным образом зависит от рабочего диапазона температур и параметров плазменного пучка. Поэтому целью настоящей работы было исследование особенности эрозии поверхности вольфрама в зависимости от температуры мишени и энергии плазменного пучка при облучении водородной плазмой.

Материалы и методы исследования

В соответствии с поставленными задачами в качестве объекта исследования был выбран вольфрам марки ВЧ, с учетом интереса к применению этих марок в термоядерных системах. Образцы в виде цилиндра диаметром 10 мм и высотой 5 мм, были вырезаны на электроэрозионном станке. Перед облучением образцы шлифовали и полировали. Образцы облучались водородной плазмой. При этом варьировались температура мишени и энергия плазменного пучка. Облучение образцов водородной плазмой было проведено на установке плазменно-пучкового разряда. Облучение образцов вольфрама осуществлялось водородной плазмой с энергией ионов 1,5-2 кэВ в течение 180 мин. Во время облучение давление в камере составило 2×10^{-3} Тор. В качестве рабочего газа использовался водород особой чистоты. Эрозия поверхности вольфрама оценивалось изучением топографии и микроструктуры поверхности, а также взвешиванием образцов до и после облучения. Исследование микроструктуры образцов вольфрама до и после облучения проводили при помощи оптического микроскопа OLIMPUS BX41M и растрового электронного микроскопа JSM-6390. Для выявления микроструктуры вольфрама использовались химическое травление в растворе, содержащей 50% плавиковой кислоты и 50% азотной кислоты. Топография и шероховатость поверхности изучались на трехмерном бесконтактном профилометре «Micro Measure 3D Station».

Результаты исследований и их обсуждение

Исследования топографии поверхности вольфрама показали, что при облучении при T=700°C на поверхности наблюдается изменение поверхности как развитии рельефа в результате неоднородного травления поверхности. Образующийся рельеф состоит из хаотически расположенных выступов и впадин различных форм. Развитие рельефа на поверхности вольфрама за счет разных скоростей эрозии соседних участков при плазменном облучении связано с тем, что различным образом ориентированные поверхностные кристаллы характеризуются различными коэффициентами распыления. При этом степень изменения рельефа и структуры поверхностного слоя облученных образцов зависит от температуры облучения. Металлографический анализ показал, что при облучении образцов вольфрама при T=1000 и 1500°C степень развития рельефа невысокое по сравнению с образцом вольфрама, облученных при T=700°C. В этих образцах наблюдается мелкие трещины, при этом с ростом температуры до 1500°C размер и количества трещин увеличивается.

Результаты исследования образцов на оптическом профилометре показан на рисунке 1. Определено, что после облучения водородной плазмой изменяется шероховатость поверхности в зависимости от температуры облучения. Наибольшее увеличение шероховатости R_a=0.0623 мкм наблюдается у образцах, облученных при T=1500°C, что связано с образованием мелких трещин на поверхностном слое. А у образцах, облученных при T=700°C, в которых поверхность состоит из хаотически расположенных выступов и впадин различных форм, параметр шероховатости составил R_a=0.0439 мкм. Наименьшее изменение шероховатости R_a=0.0377 мкм наблюдается у образцах, облученных при T=1000°C. Эти результаты хорошо согласуется с результатами металлографического анализа.

Таким образом, можно утверждать что при облучении вольфрама и молибдена водородной плазмой основным рельефообразующим механизмом является распыление поверхности и эрозия характеризуется термическим травлением поверхности.

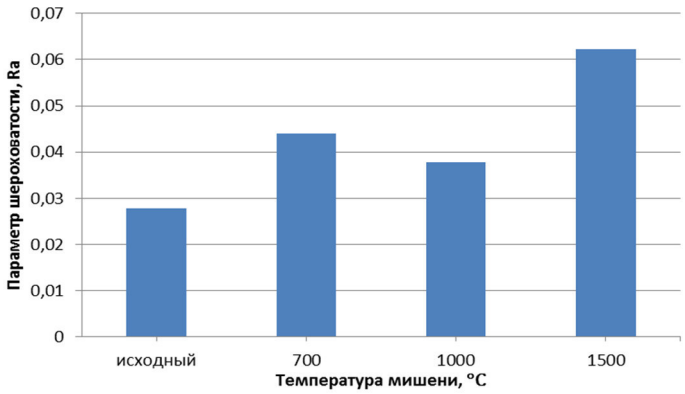


Рис. 1. Результаты исследований на оптическом профилометре

Эрозии образцов вольфрама, также, оценивали методом взвешивания образцов до и после облучения. Результаты показали, что с повышением температуры облучения степень эрозии увеличивается, что вполне закономерно. Известно, что в случае облучения металлов и сплавов ионами и плазмой инертных газов при температурах выше температуры отжига элементарных дефектов, созданных облучением, формирование рельефа происходит, в основном, благодаря распылению поверхности за счет кинетической энергии ионов по каскадному механизму.

Заключение

1. Таким образом, установлено, что при облучении на поверхности наблюдается изменение поверхности как развитии рельефа в результате неоднородного травления поверхности. При этом степень изменения рельефа и структуры поверхностного слоя облученных образцов зависит от температуры облучения. Металлографический анализ показал, что при облучении образцов вольфрама при T=1000 и 1500°C степень развития рельефа невысокое по сравнению с образцом вольфрама, облученных при T=700°C. Однако, на этих образцах наблюдается мелкие трещины, при этом с ростом температуры до 1500°C размер и количества трещин увеличивается.

2. Полученные результаты показали, что с увеличением температуры мишени и энергии ионов увеличивается степень эрозии поверхности. В силу своих теплофизических свойств заметная эрозия вольфрама в результате облучения потоками плазмы, имитирующих стационарный режим плазмы, наступает только при относительно высоких температурах мишени.

Настоящая работа выполнена при финансовой поддержке Комитета науки МОН РК на 2015-2017 гг. по программе «Грантовое финансирование научных исследований».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Loarte A., Saibene G., SartoriR. et al. Transient heat loads in current fusion experiments, extrapolation to ITER and consequences for its operation // Physica Scripta. 2007. V. 2007. Issue T128. P. 222 - 228.
2. Skinner C.H., Haasz A.A., Alimov V.Kh., Bekris N., Causey R.A., Clark R.E.H., Coad J.P., Davis J.W., Doerner R.P., May-er M., Pisarev A., Roth J., Tanabe T. — Fusion Sci. Technol., 2008, vol. 54, p. 891.
3. Pitts R.A. et al. — J. of Nuclear Materials, 2011, vol. 415, S957.
4. Позняк И.М., Климов Н.С., Подковыров В.Л. и др. - ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез, 2012, вып. 4, с 23-33

ВЛИЯНИЕ БОРА НА МЕХАНИЧЕСКИЕ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА В СПЛАВАХ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА

К.А. Реунова

Научные руководители: гл.н.с., д.ф.-м.н., И.В. Киреева, профессор, д.ф.-м.н. Ю.И. Чумляков

Национальный исследовательский Томский государственный университет,

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

E-mail: reunova.ksenya@mail.ru

THE EFFECT OF BORON ON MECHANICAL AND FUNCTIONAL PROPERTIES IN THE IRON-BASED ALLOY

K.A. Reunova

Scientific Supervisors: leading researcher, Dr., I.V. Kireeva, professor, Dr. Yu.I. Chumlyakov

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

E-mail: reunova.ksenya@mail.ru

Abstract. *The mechanical properties and superelastic behavior were studied on [001]-single crystals of Fe-28%Ni-17%Co-11.5%Al-2.5% X (at. %) (X=Ta, TaB) alloy. It is shown that boron affects on the mechanical and functional properties in the iron-based alloy.*

Введение. Известно, что сплавы на основе железа испытывают термоупругое γ–α' (γ-ГЦК – гранецентрированная кубическая решетка, α'-ОЦТ – объемноцентрированная тетрагональная решетка) мартенситное превращение (МП) при выделении в процессе старения наноразмерных дисперсных частиц γ'-фазы атомноупорядоченной по типу $L1_2$ размером d=3–30 нм [1]. Частицы γ'-фазы повышают уровень прочностных свойств высокотемпературной фазы, увеличивают тетрагональность α'- мартенсита, уменьшают величину термического гистерезиса, и приводят к смене механизма деформации инвариантной решетки от скольжения к двойникованию. Для того чтобы такие сплавы могли активно использоваться, необходимы систематические исследования на монокристаллах этих сплавов различных составов [2]. Поэтому цель настоящей работы является изучение влияния бора концентрацией 0,05 ат. % на механические и функциональные свойства, на температуры МП в монокристаллах, где бор выделяется в теле зерна, в отличие от поликристаллов, где бор выделяется по границам зерен и используется для подавления образования β-фазы.

Материалы и методы исследования. Монокристаллы сплавов Fe-28%Ni-17%Co-11.5%Al-2.5% X (ат. %) (X=Ta, TaB) выращивали методом Бриджмена в атмосфере гелия. Для исследования были выбраны монокристаллы, ориентированные вдоль [001]-направления, так как именно в этом направлении при растяжении достигается максимальная теоретическая величина деформации решетки ε_0[001]=8,7 % при γ–α' МП. Исследование температурной зависимости осевых напряжений и величины СЭ изучали на кристаллах после старения при T=973 К в течение 30 минут на испытательной машине Instron-5969.

Результаты. Экспериментально установлено, что после старения при T=973 К в течение 30 минут в монокристаллах Fe-28%Ni-17%Co-11.5%Al-2.5% X (ат. %) (X=Ta, TaB) выделяются частицы γ'-фазы размером d<3-5 нм. Исследование зависимости $\rho(T)$ после старения при T=973 К в течение 30 минут не

обнаруживает в температурном интервале переходов связанных с МП. Для того чтобы установить, что в данных сплавах реализуется МП проводили исследования температурной зависимости осевых напряжений $\sigma_{0,1}(T)$ при деформации растяжением.

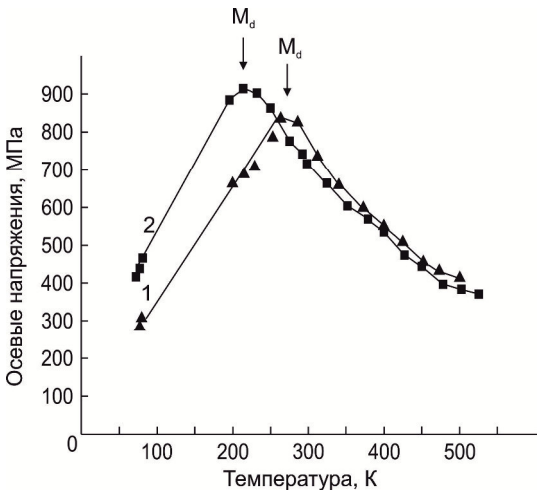


Рис.1 Температурная зависимость осевых напряжений $\sigma_{0,1}(T)$ для [001]-ориентации монокристаллов сплава: 1 – Ta , 2 – TaB, состаренных при T=973 K в течение 30 минут при деформации растяжением

Из рис.1 видно, что данная зависимость имеет вид типичный для сплавов испытывающих МП под нагрузкой, на ней можно выделить две стадии. Первая стадия от 77 К $<T<$ M_d, где напряжения $\sigma_{0,1}$ возрастают с увеличением температуры испытания, описывается соотношением Клапейрона-Клаузиуса:

$$\frac{d\sigma_{0,1}}{dT} = -\frac{\Delta H}{\varepsilon_0 T_0}, \qquad (1)$$

здесь ΔH – изменение энтальпии при γ–α' МП; ε_0 – деформация решетки, которая зависит от ориентации кристалла; T_0 – температура химического равновесия γ- и α'- фаз. Вторая стадия при температуре выше M_d сопровождается уменьшением $\sigma_{0,1}(T)$ и связана с пластической деформацией высокотемпературной фазы, характеризуется нормальной температурной зависимостью предела текучести типичной для ГЦК материалов.

Таблица 1

Функциональные и механические свойства монокристаллов сплава Fe-28%Ni-17%Co-11.5%Al-2.5% X (ат. %) (X=Ta, TaB), состаренных при T=973 K в течение 30 минут, при деформации растяжением

Сплав	$T(M_d)$, К	$\sigma_{0,1}(M_d)$, МПа	$\alpha=d\sigma_{0,1}/dT$, МПа/К	ε_0, %	$\varepsilon_{сэ}$, %
Ta	270	840	2,5	8,7	9,2
TaB	214	910	2,5	8,7	7,4

Анализ данных, представленных на рис.1 и в таблице 1 показывает, во-первых, при T=77 К напряжения в сплаве с Ta оказались на 130 МПа ниже, чем в сплаве TaB, следовательно легирование бором понижает температуру M_s. Во-вторых, бор не оказывает влияние на величину $\alpha=d\sigma_{0,1}/dT$. И, в третьих, легирование бором концентрацией 0,05 ат. % не приводит к упрочнению высокотемпературной фазы.

Доказательством того, что в исследуемых кристаллах реализуется термоупругое МП, является проявление СЭ. На рис.2 показаны результаты по циклированию СЭ при температуре 77 К для монокристаллов сплава Fe-28%Ni-17%Co-11.5%Al-2.5% X (ат. %) (X=Ta, TaB).

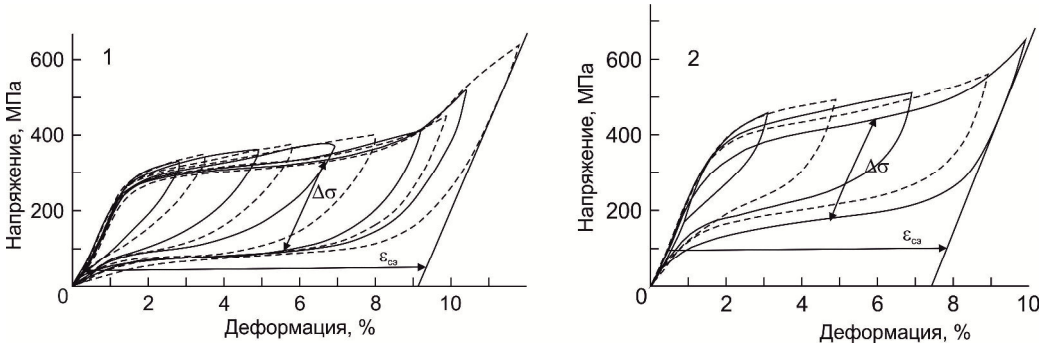


Рис.2 Сверхэластичность при T=77 К для [001]-ориентации монокристаллов сплава: 1 –Ta и 2 – TaB, состаренных при T=973 К в течение 30 минут при деформации растяжением

Видно, что в кристалле с Ta величина $\varepsilon_{сэ}$=9,2 %, и по величине превышает теоретическую величину деформации решетки ε_0=8,7 % для данной ориентации. Это связано с развитием упругого двойникования по (110)-плоскостям в α'-мартенсите [3]. Петля СЭ характеризуется широким механическим гистерезисом $\Delta\sigma$=260 МПа. В кристаллах TaB величина $\varepsilon_{сэ}$=7,4 % оказывается меньше теоретического значения деформации решетки, что связано с более высокими $\sigma_{0,1}$ при T=77 К по сравнению с Ta.

Заключение. Таким образом, экспериментально установлено, что в [001]-монокристаллах сплавов Fe-28%Ni-17%Co-11.5%Al-2.5% X (ат. %) (X=Ta, TaB) при деформации растяжением, легирование бором приводит к понижению температуры M_s, не изменяет величину $\alpha=d\sigma_{0,1}/dT$, не влияет на повышение прочностных свойств исходной фазы и не подавляет СЭ.

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда (проект № 14-29-00012).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кокорин В.В. Мартенситные превращения в неоднородных твердых растворах. – Киев: Наука думка, 1987. – 168 с.
2. Чумляков Ю. И., Киреева И. В., Куц О. А., Платонова Ю. Н., Поклонов В. В., Куксгаузен И. В., Куксгаузен Д. А., Панченко М. Ю., Реунова К. А. Термоупругие мартенситные превращения в монокристаллах сплавов FeNiCoAlX(B) // Известия Вузов. Физика. – 2015. – Т. 58. – № 11. – С. 61–68.
3. Chumlyakov, Y. I., Kireeva, I. V. (2016) Unusual reversible twinning modes and giant superelastic strains in FeNiCoAlNb single crystals // Scripta Materialia. V. 119, pp. 43–46.

МОДЕЛИРОВАНИЕ НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ СЕГМЕНТА ШЕЙНОГО ОТДЕЛА ПОЗВОНОЧНИКА ПРИ НАКЛОНЕ ВПЕРЕД

Ю. А. Рикун, А. В. Телегина

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

MODELING OF STRESS-STRAIN STATE OF CERVICAL SPINE SEGMENT AT FLEXION

Yu. A. Rikun, A.V. Telegina

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 segment C3-C4 cervical spine is regarded. The influence of degenerative changes of the intervertebral disc on the mechanical behavior of the segment is studied.*

Современная медицина все чаще сталкивается с проблемой оптимального выбора имплантата, способного восстановить утраченные функции организма. Адекватный выбор имплантатов возможен на основе исследования поведения структур человеческого организма. Использование методов компьютерного моделирования создает предпосылки для более глубокого понимания закономерностей функционирования человеческого организма в норме и при патологиях, способствующего разработке рекомендаций по созданию и подбору имплантатов замещающих отдельный орган или его часть и эффективных методов коррекции системы в целом.

Целью данной работы является моделирование напряженно-деформированного состояния сегмента С3-С4 шейного отдела позвоночника с учетом деградации межпозвоночного диска.

На рисунке 1 представлена геометрическая модель сегмента С3-С4 шейного отдела позвоночника.

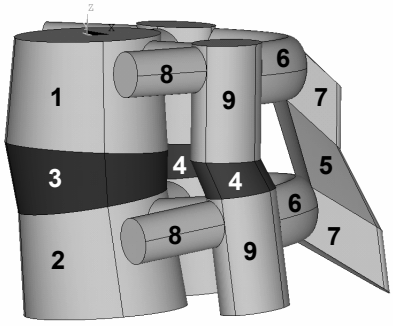
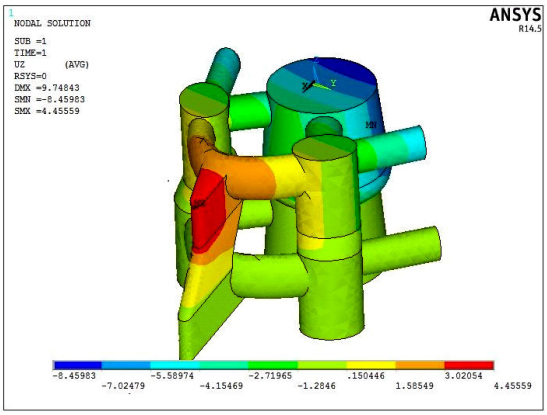


Рис. 1. Геометрическая модель сегмента шейного отдела позвоночника

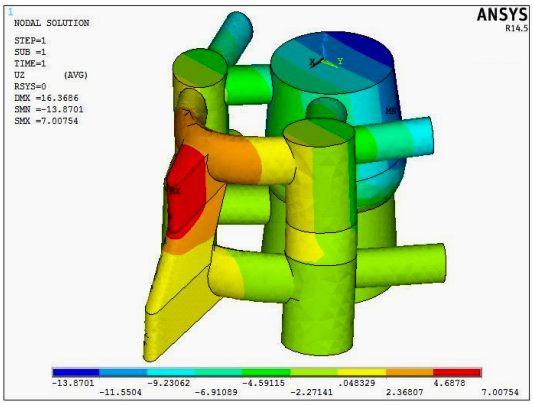
Геометрическая модель состоит из позвонков С3 (№1) и С4 (№2), межпозвоночного диска (МПД) (№3), фасеточных суставов (№4), межостистой связки (№5), задних дуг позвонков (№ 6), остистых (№7), поперечных (№8) и суставных (№9) отростков. Ось Z системы координат направлена вдоль оси сегмента.. В позвонках учитывалось наличие компактной и губчатой 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. Дегенеративные изменения межпозвоночного диска моделировались посредством уменьшения высоты диска с 6 мм до 4.5 мм и увеличения его модуля упругости от 2,5 МПа до 98 МПа в соответствие с данными работ [1,2], что в реальности наблюдается в результате уменьшения содержания воды в диске[3]. Проводился расчет напряженно-деформированного состояния модельного сегмента шейного отдела позвоночника. Нижняя поверхность тела позвонка С4 жестко фиксировалась Верхняя поверхность позвонка С3 была нагружена силой равной 1000 Н. В центральной точке верхней поверхности тела позвонка С3 задавался момент на сгибание в отрицательном направлении оси *X*, равный 7,5 Нмм [4]. Заданные нагрузки соответствуют физиологическому сгибанию сегмента шейного отдела позвоночника.

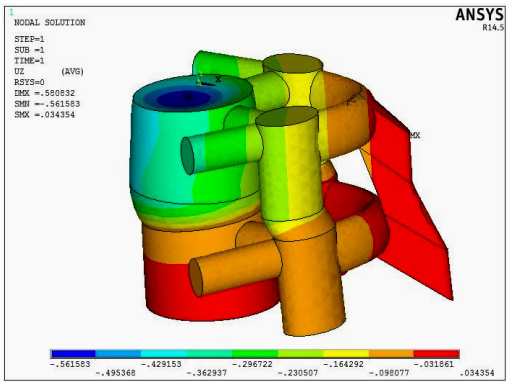
На рисунке 2 представлены поля перемещений *UZ* сегментов, отличающихся высотой *h* и модулем упругости *E* межпозвоночного диска.



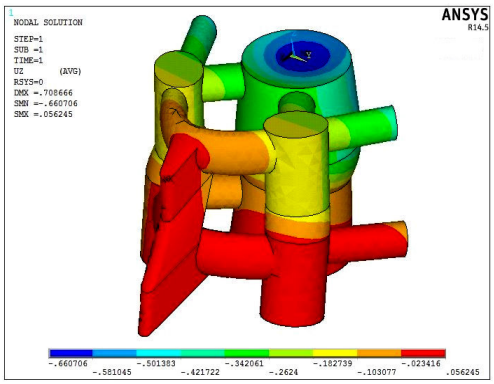
h=4,3мм, E=2,5 МПа



h=6,0 мм, E=2,5 МПа



h=4,3мм, E=98 МПа

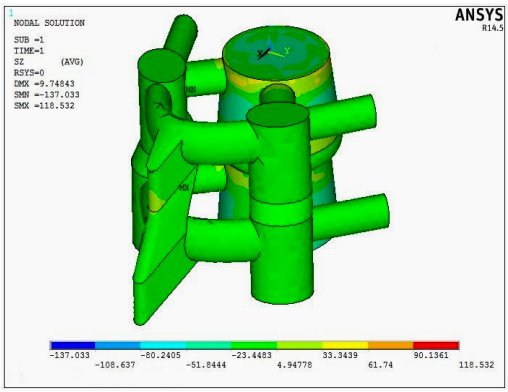


h=6,0 мм, E=98 МПа

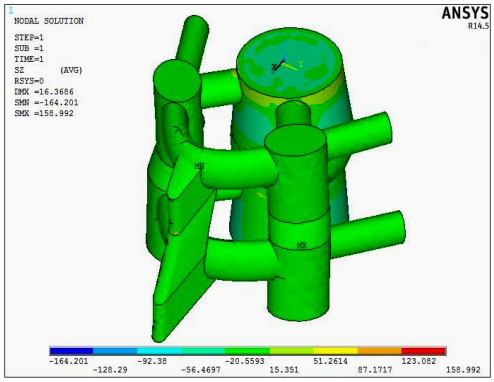
Рис. 2. Поля перемещений UZ (мм) сегментов

При модуле упругости диска 2.5 МПа, наибольшее сжатие в направлении оси *Z* наблюдается в передней части тела позвонка С3, затрагивая верхнюю часть межпозвоночного диска, а растяжение в остистом отростке позвонка С3. При увеличении модуля упругости МПД происходит смещение области наибольшего сжатия к центру верхней поверхности позвонка С3. Уменьшение высоты МПД, также как и увеличение его модуля упругости, приводит к снижению степени сжатия и растяжения указанных областей в направлении оси Z.

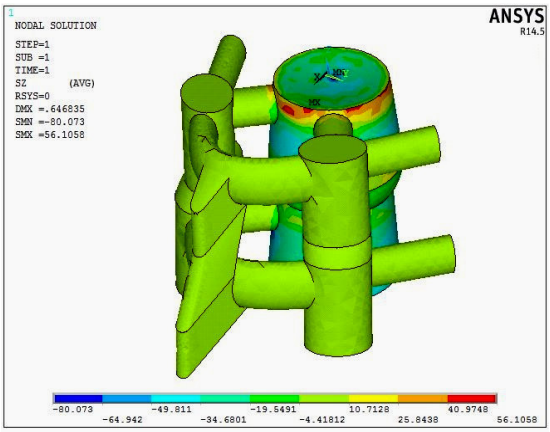
На рисунке 3 представлены распределения напряжений σ_z в сегментах, отличающихся высотой h и модулем упругости E межпозвоночного диска.



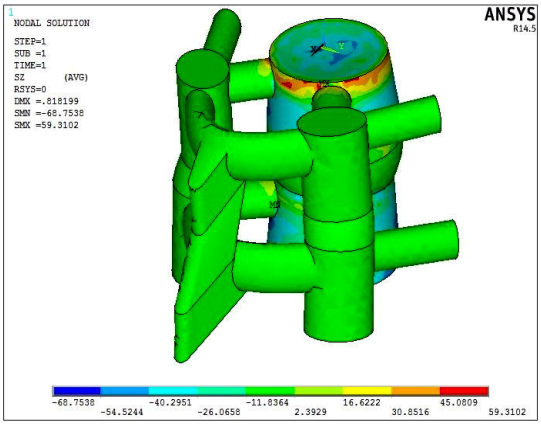
h=4,3мм, E=2,5 МПа



h=6,0 мм, E=2,5 МПа



h=4,3мм, E=74,125 МПа



h=6,0 мм, E=74,125 МПа

Рис. 3. Распределение напряжений σ_z (МПа) в сегментах

При значении модуля упругости диска 2.5 МПа, максимальные сжимающие и растягивающие напряжения локализуется в областях соединения ножек и суставных отростков.

С увеличением модуля упругости МПД максимальные растягивающие напряжения локализуются в верхней части боковой поверхности тела позвонка С3, а максимальные по модулю сжимающие напряжения в центральной части верхней поверхности позвонка С3.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. 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.
2. 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.
3. Кремер Ю. Заболевания межпозвонковых дисков / под общ. ред. проф. В. А. Широкова. – М. : МЕДпресс-информ, 2013. – 472 с.
4. Hueston S. Cervical Spine Anthropometric and Finite Element Biomechanical Analysis // Human Musculoskeletal Biomechanics. – 2012. – Ch. 6. - P. 107–158.

ПОЛУЧЕНИЕ КОМПОЗИЦИОННОЙ СИСТЕМЫ КАРБИД ЦИРКОНИЯ – УГЛЕРОД (ZrC–C) МЕТОДОМ ГОРЯЧЕГО ПРЕССОВАНИЯ

А.В. Рыгин[1], Ю.А. Мировой[1,2]

Научный руководитель: профессор, д.т.н. С.П. Буякова[1,2]

[1]Национальный исследовательский Томский политехнический Университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 634050

[2]Институт физики прочности и материаловедения СО РАН,

Россия, г. Томск, пр. Академический 2/4, 634055

E-mail: avr7@tpu.ru

PREPARATION OF ZIRCONIUM CARBIDE – CARBON (ZrC–C) COMPOSITION SYSTEM BY HOT PRESSING

A.V. Rygin[1], Yu.A. Mirovoy[1,2]

Scientific Supervisor: Prof., Dr. S.P. Buyakova[1,2]

[1]Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin ave., 30, 634050

[2]Institute of Strength Physics and Materials Science of SB RAS, Russia, Tomsk, Akademicheskii ave., 634055

E-mail: avr7@tpu.ru

Abstract. *Developing of high-technology aerospace engineering needs for new generation of ultra-high temperature materials. Carbide-carbon composites might be one of these materials. This paper shows obtaining of composition material based on zirconium carbide with addition of carbon black by hot pressing. Stoichiometric zirconium monocarbide and carbon black powders were used in experiment. Temperature of preparation was about 1800 °C, pressure was about 22.6 MPa. Samples were studied by XRD-analysis and optical microscopy. Most of homogeneous structure was found at the sample with 10 vol.% carbon.*

Введение. Одной из основных задач развития авиационной и ракетно-космической отрасли заключается в поиске высокотемпературных материалов нового поколения, способных функционировать в экстремальных условиях при температурах до ~2000 °С. КПД турбореактивных двигателей напрямую зависит от температуры сгорания топлива, что предъявляет новые требования к термохимической эрозии и термомеханической прочности материалов. Карбид-углеродные системы металлов переходной IV группы, также устойчивые к окислению[1,2], могут являться решением поставленной задачи. Помимо этого, данные материалы обладают способностью поглощать и рассеивать энергию упругих деформаций возникающих при распространении трещин, что свидетельствует о высокой устойчивости к тепловым ударам[3].

Приборы и материалы. В качестве исходных компонентов использованы порошки карбида циркония и технического углерода. Полученные смеси подготавливались посредством ручного перемешивания и механической обработкой порошков в планетарной мельнице в течении 5 минут, объемная доля углерода составляет 0-15 %об. Образцы получены методом горячего прессования при температуре ~1800 °С и давлении прессования 22,6 МПа в атмосфере аргона. Рентгенограммы получены на дифрактометре Shimadzu XRD-7000S (результаты предоставлены НОИЦ «Наноматериалы и Нанотехнологии» ТПУ) с применением монохроматического Cu-Kα излучения.

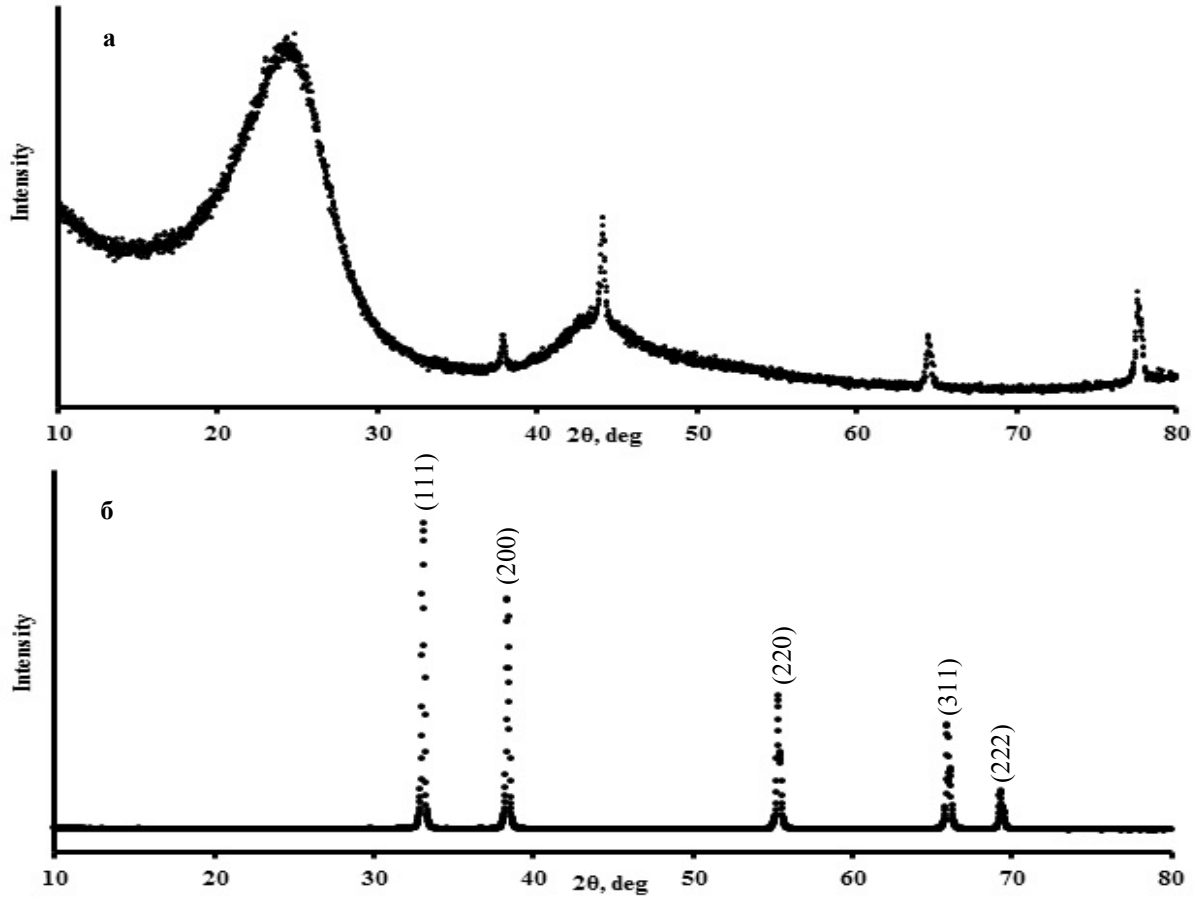


Рис 1. Рентгенофазовый анализ порошков: а – технического углерода С; б – карбида циркония ZrC

Результаты. На рисунке 1 представлены рентгенограммы исходных порошков. Четко выражены основные пики карбида циркония (рисунок 1б), отсутствуют какие-либо значительные примеси, период решетки 0,4695 нм. Для углерода (рисунок 1а) наблюдается значительное уширение пиков, что может говорить о наличии как аморфной, так и нанокристаллической фаз, что требует дополнительного уточнения при помощи методов электронной микроскопии.

Оптические снимки структуры поверхности образцов карбид-углеродных композитов представлены на рисунке 2. Образцы, содержащие углеродной фазы 5 %об. (рисунки 2а,б), обладают достаточно разнородной структурой, как для механически обработанного, так и для не обработанного образца, присутствует ярко выраженная пористость и распределение углерода в матрице карбида. Иной характер представлен для образцов с содержанием углерода 10 %об. Для порошков, не подвергнутых механической обработке (рисунок 2,в), следует отметить равномерное распределение углерода в карбидном образце, а также наличие крупных агломератов углерода на поверхности. Из обработанных порошков (рисунок 2,г), получены образцы, обладающие однородной структурой распределения углерода в композите без ярко выраженных скоплений, что говорит о более высокой однородности полученного материала. Композит с 15 %об. долей углерода (без механической обработки; рисунок 2,д) обладает структурой сходной с 10 %об. образцом. Механическая обработка приводит к возникновению островков в композите (рисунок 2,е), которые «обеднены» углеродной добавкой.

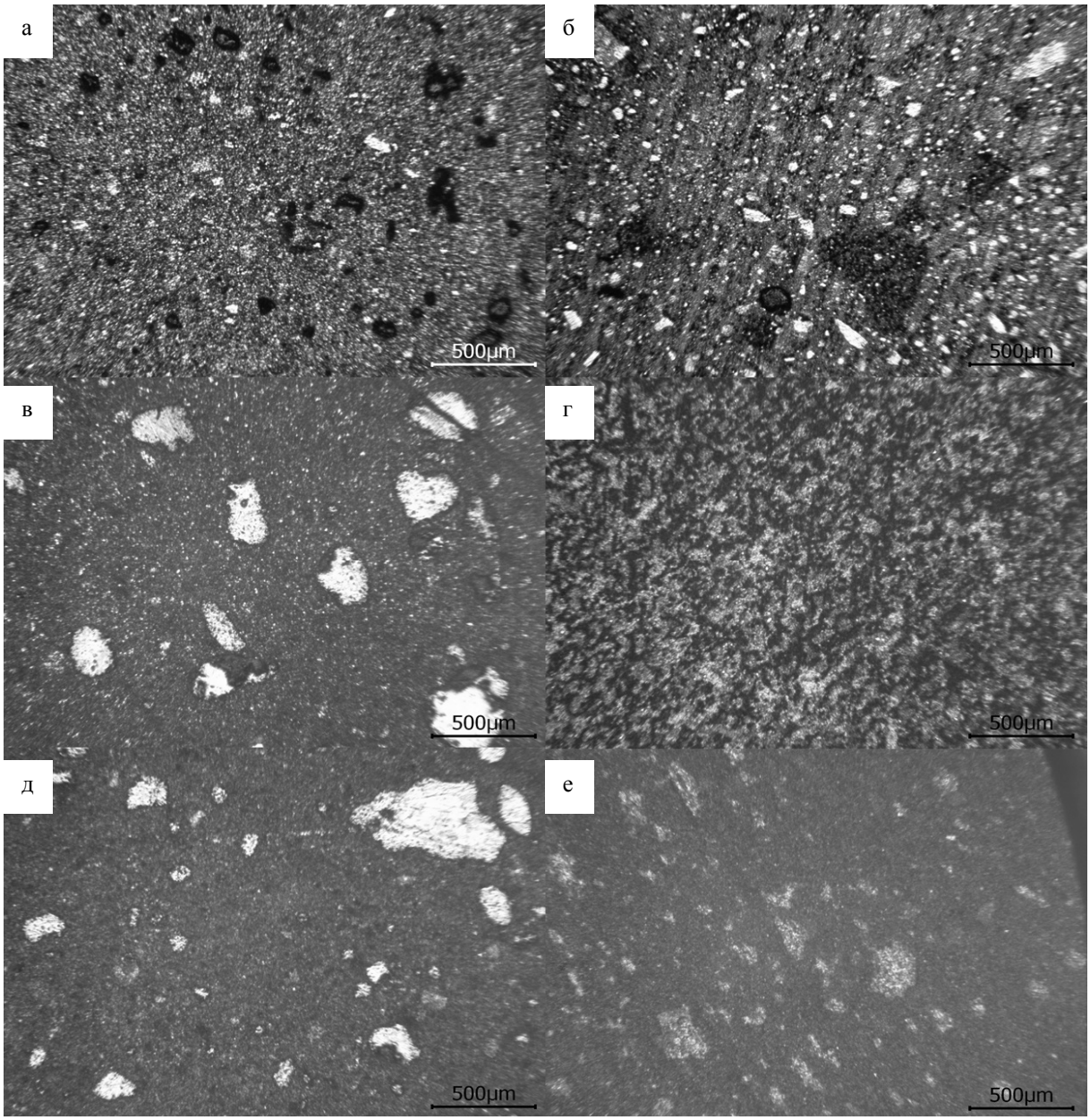


Рис. 2 Микроснимки поверхности образцов композиционных систем ZrC–C: а,б – содержание углерода С 5%об. (с/без МА); в,г – С 10%об. (с/без МА); д,е – С 15%об. (с/без МА)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hasselman, D. P. H., Becher, P. F., & Mazdiyasni, K. S. (1980). Analysis of the resistance of high□E, low□E brittle composites to failure by thermal shock. Materialwissenschaft Und Werkstofftechnik, 11(3), 82-92.
2. Shabalin, I. L., Tomkinson, D. M., & Shabalin, L. I. (2007). High-temperature hot-pressing of titanium carbide-graphite hetero-modulus ceramics. Journal of the European Ceramic Society, 27(5), 2171-2181.
3. Shabalin, I. L., Wang, Y., Krynkin, A. V., Umnova, O. V., Vishnyakov, V. M., Shabalin, L. I., & Churkin, V. K. (2010). Physicomechanical properties of ultrahigh temperature heteromodulus ceramics based on group 4 transition metal carbides. Advances in Applied Ceramics, 109(7), 405-415.

НАНЕСЕНИЕ ПОКРЫТИЯ ZrTiCu НА ЗАЭВТЕКТИЧЕСКИЙ СИЛУМИН (20-22 ВЕС.% Si) ИОННО-ПЛАЗМЕННЫМ МЕТОДОМ

М.Е. Рыгина[1], Е.А. Петрикова[2], В.В. Шугуров[2]

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. Ю.Ф. Иванов[1,2]

[1]Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

[2]Институт сильноточной электроники СО РАН

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

E-mail: L-7755me@mail.ru

COATING DEPOSITION TIZRCU ON HYPERUETECTIC SILUMIN BY ION-PLASMA METHOD

M.E. Rygina[1], E.A. Petrikova[2], V.V. Shugurov[2]

Scientific Supervisor: Prof., Dr. Yu.F. Ivanov[1,2]

[1]Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

[2]Institute of High Current Electronics SB RAS, Russia, Tomsk, Academic str., 2/3, 634055

E-mail: L-7755me@mail.ru

Abstract. *In this article hyptreutectic silumin has been studied. The content of silicon is 20-22 wt.%. TiZrCu has been repositioned on this alloy. His thickness is 1 micron. Deposition performed by "TRIO"(Institute of High Current Electrons of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences). In this article the structures before and after modification are shown. Microhardness grows more than 2 times, Nanohardness more than 5 times. Scanning microscopy shows that content of Ti, Zr, Cu are near 1%.*

Введение. Заэвтектический силумин – литейный сплав алюминия с кремнием с процентным содержанием последнего выше 12 вес.%. Заэвтектический силумин состоит из эвтектики, первичных зерен кремния и интерметаллидов. Данный сплав обладает низким коэффициентом термического расширения, коррозионной стойкостью, малым весом, повышенной фрикционной износостойкостью [1]. Ряд недостатков, таких как низкие механические свойства, неоднородность структуры, ограничивают его применение в машиностроении. Именно наличие первичных зерен кремния, обладающих повышенной твердостью и хрупкостью, приводят к недостаточно высоким свойствам заэвтектического силумина. Ионно-электронные методы позволяют устранить данные недостатки путем существенного диспергирования структуры, и, как следствие, приводят к повышению механических характеристик [2].

Целью данной работы является изучение структуры, формирующейся при напылении покрытия ZrTiCu толщиной 1 мкм на поверхность заэвтектического силумина (20-22 вес.% Si) с помощью ионно-плазменной обработки на установке «ТРИО» (ИСЭ СО РАН, г. Томск).

Материал и методика исследования. В качестве материал исследования были выбраны образцы силумина состава Al-(20-22) вес.%Si. Систему «пленка (Zr-5%Ti-5%Cu) / (Al-(20-22) вес.%Si) подложка» формировали ионно-плазменным методом при электродуговом распылении катода состава Zr-5%Ti-

5%Cu на установке «ТРИО» (Институт сильноточной электроники Сибирского отделения Российской академии наук) [3] Толщина пленки 1 мкм.

Образцы были исследованы методами оптической (μVizo - MET-221) и электронной сканирующей (SEM-515 Philips) микроскопии. Испытания на твердость проводились на приборе ПМТ-3. Исследования износостойкости силумина проводилось в геометрии диск-штифт при комнатной температуре и влажности. Объем износа материала определялся после проведения профилометрии образовавшегося трека. Измерение нанотвердости и модуля Юнга производилось на установке ультрамикротвердомер Shimadzu DUH-211S.

Результаты и их обсуждение. С помощью оптического микроскопа были получены изображения структуры заэвтектического силумина до и после нанесения металлической пленки (рисунок 1). Пленка не обладает необходимой толщиной для изменения оптических свойств, поэтому отчетлива видна структура силумина: первоначальные зерна кремния и эвтектика (Al-Si). Видно, что напыляемая пленка содержит микрокапли металла распыляемого катода, средний диаметр которых составил 21,7 мкм. Наличие данных капель указывает на неоднородность свойств сформированной системы «пленка / подложка», так как в местах скопления капель и самих каплях механические свойства будут отличаться от среднего значения материала.

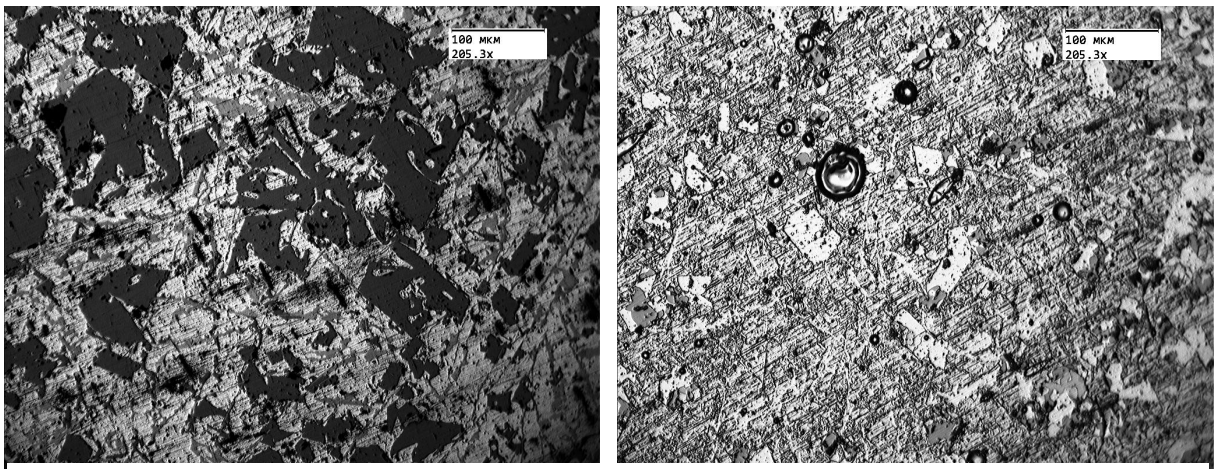


Рис. 1. Оптическое изображение структуры заэвтектического силумина: а) в исходном состоянии, б) после напыления пленки ZrTiCu (увеличение 205х)

Микротвердость (прибор ПМТ-3) системы «пленка / подложка» составила 2309 МПа, при твердости исходного силумина 970 МПа, т.е. выявлено увеличение микротвердости материала более чем в 2 раза. При измерении твердости ультрамикротвердомером Shimadzu DUH-211S выявлено значение нанотвердости 5612 МПа. Расхождение в значениях связаны с глубиной проникновения индентора; при измерении нанотвердости минимизируется влияние основного объема материала. Выполнены трибологические испытания системы «пленка / подложка». Установлено, что коэффициент трения составил 0,36, износостойкость уменьшилась в 3 раза.

На рисунке 2 приведена рентгенограмма с указанием фаз, присутствующих в составе исследуемой системы «пленка / подложка». Данная рентгенограмма свидетельствует о формировании многофазного поверхностного слоя. На рисунке 3 приведено изображение системы «пленка / подложка», полученное с помощью сканирующего микроскопа.

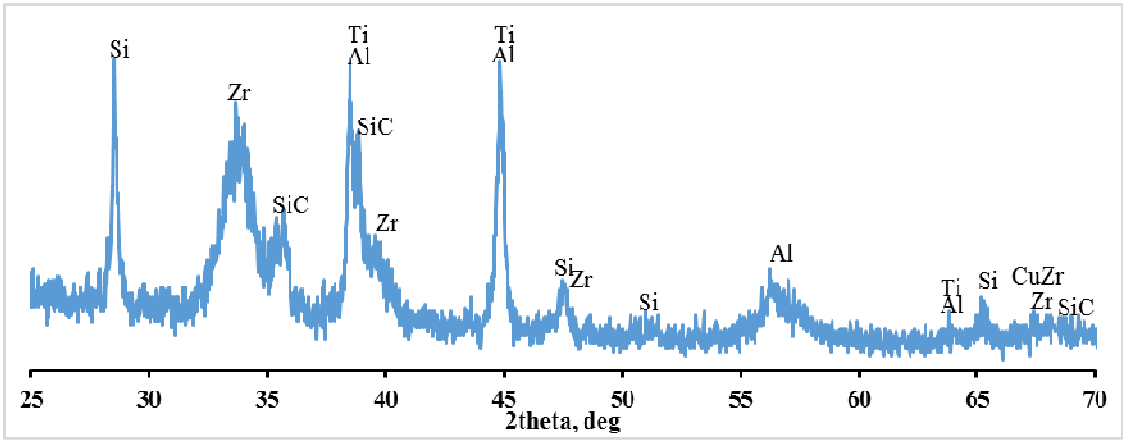


Рис. 2. Участок рентгенограммы заэвтектического силумина с покрытием ZrTiCu

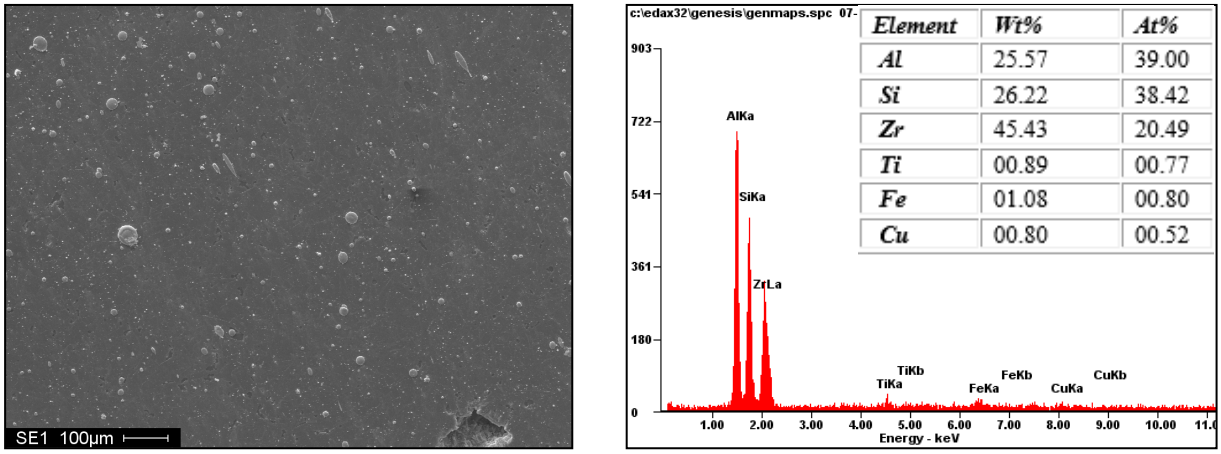


Рис. 3. Структура системы «пленка / подложка» и результаты микрорентгеноспектрального анализа участка поверхности образца (сканирующая электронная микроскопия)

Заключение. Сформирована система «пленка (ZrTiCu)/(Al-20-22 вес.%Si) подложка». Показано, что формирование многофазного материала сопровождается увеличением микротвердости поверхностного слоя более чем в 5 раз, снижением коэффициента трения до 0,36, уменьшением износостойкости в 3 раза. Последующее модифицирование материала предполагается осуществить облучением системы пленка/подложка импульсным электронным пучком.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Стеценко В.Ю. Заэвектический силумин. Наноструктурные процессы плавки и литья // Литье и металлургия. – 2016. – Т. 4. – № 65. – С. 19–22.
2. M.E. Rygina, Yu.F. Ivanov, A.P. Lasconev, A.D. Teresov, N.N. Cherenda, V.V Uglov, E.A. Petricova, M.V. Astashinskay Modification of the sample`s surface of hypereutectic silumin by electron beam // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering 124(2016) 012138 pp. 1-5
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.

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ ОБРАБОТКИ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА БЫСТРОРЕЖУЩЕЙ СТАЛИ

Ж.Б. Сагдолдина, Б.К. Рахадилов, А.А. Мякинин
Научный руководитель: профессор, д.ф-м.н. М.К. Скаков
Национальный ядерный центр Республики Казахстан,
Казахстан, г. Курчатов, ул. Красноармейская 2, 071100
E-mail.ru: Sagdoldina@mail.ru

EFFECT OF ELECTRON-BEAM TREATMENT ON THE PROPERTIES OF HIGH SPEED STEEL

Zh.B. Sagdoldina, B.K. Rakhadilov A.A. Myakinin
Scientific Supervisor: Prof., Dr. M.K. Skakov
National Nuclear Center of the Republic of Kazakhstan,
Kazakhstan, Kurchatov city, Krasnoarmeyskaya st. 2, 071100
E-mail.ru: Sagdoldina@mail.ru

Abstract. *Results of research influence of the modes of electron beam processing on structure and properties of P6M5 high-speed cutting steel are presented in article. On the basis of pilot studies, the optimum mode of electron beam processing of high-speed cutting steel is chosen. It is experimentally defined that after electron beam processing the microhardness of P6M5 high-speed cutting steel increases to 950 MPa and wear resistance increases to 1,3 times in comparison with initial material. It is established that electron beam processing allows receiving the modified layer with a high hardness and high resistance to abrasive wear. Substantial increase of microhardness and wear resistance of high-speed cutting steels after electron beam processing shows prospects of application of this way of processing for increase of operability of the cutting tools from high-speed cutting steels.*

Введение. Одной из важнейших проблем современного машиностроения является обеспечение максимальной износостойкости металлообрабатывающего инструмента при различных условиях нагружения в процессе обработки деталей резанием [1]. Долговечность инструмента зависит не только от свойств материала, определяемых технологией изготовления и объемного упрочнения, но и в значительной степени от свойств поверхности. В последние годы получили развитие новые способы обработки поверхности, использующие концентрированные потоки энергии. Они позволяют существенно сократить время обработки, а также снижать энергозатраты на проведение обработки [2]. Кроме того, высокоэффективные способы обработки позволяют получать структурно-фазовые состояния поверхности, недостижимые при использовании традиционных технологий. В связи с вышеизложенным, целью данной работы является исследование влияния режимов электронно-лучевой обработки на структуру и свойства быстрорежущей стали Р6М5.

Материалы и методы исследования

В соответствии с поставленной задачей в качестве объекта исследования была выбрана быстрорежущая вольфрамомолибденовая сталь Р6М5. Заготовки образцов для исследований в виде параллелепипедов с размером 8х15х15 мм^3 вырезали из режущих инструментов (фрезы) из стали Р6М5,

подвергнутых стандартной для этой стали термообработке: закалке от 1230°С в масле и последующему трехкратному отпуску при 560°С (длительность каждого отпуска 1 ч, охлаждение в воздухе).

Облучение образцов стали Р6М5 электронным пучком проводили на ускорителе ЭЛВ-4. Перед облучением образцы стали были отшлифованы и отполированы.

Металлографические исследования проведены на оптическом микроскопе «ALTAMI-MET-1M». Морфологию структуры поверхности изучали на растровом электронном микроскопе JSM-6390LV, оснащенным приставкой энергодисперсионного анализа. Исследования фазового состава и кристаллической структуры образцов осуществляли методами рентгеноструктурного анализа на дифрактометре X'PertPro с использованием CuK_{α}- излучения. Микротвердость образцов измеряли методом вдавливания алмазного индентора на приборе ПМТ-3М при нагрузке 100 г и выдержке под нагрузкой 10 с. Испытания образцов на абразивный износ проводили на экспериментальной установке для испытаний на абразивное изнашивание при трении о не жестко закрепленные частицы абразива по схеме «вращающийся ролик – плоская поверхность» в соответствии с ГОСТ 23.208-79, который совпадает с американским стандартом АСТМ С 6568. Износ замеряли весовым методом на аналитических весах АДВ-200 с точностью до 0,0001 г.

Результаты исследований и их обсуждение

На рисунке 1 приведены значения микротвердости поверхности образцов стали Р6М5 до и после электронного облучения. На основе анализа полученных результатов по определению микротвердости установлено, что микротвердость значительной степени зависит от значения тока электронного пучка и не сильно зависит от энергии пучка. При этом определено, что облучение с продолжительностью до 1 сек не приводит к значительному изменению миротвердости, а увеличение продолжительности до 9,6 секприводит к уменьшению микротвердости. Самое большое значение микротвердости наблюдается после облучение при энергии электронного пучка 1,2 и тока 40 мА.

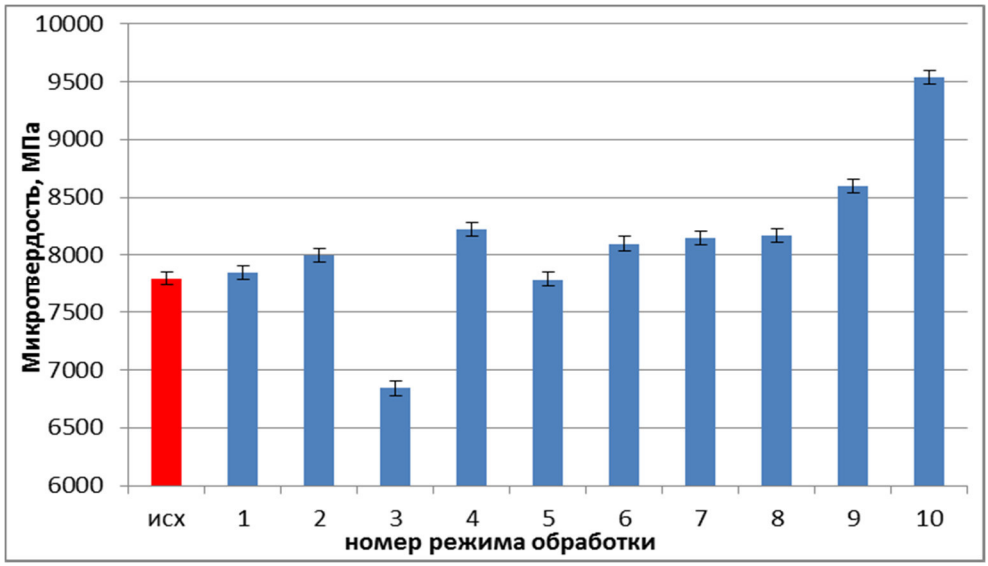


Рис. 2. Зависимость микротвердости поверхностного слоя стали Р6М5 от режима ЭЛО

Результаты испытания образцов на абразивный износ охарактеризовали потерей массы образцов после испытания. Значительное увеличение износостойкости наблюдается после ЭЛО следующих

режимах: E=1,3 и I=35 мА; E=1,2 и I=40 мА.

Металлографический анализ показал, что после облучения электронным пучком энергией 1,3 МэВ, током 35 мА и энергией 1,2 МэВ, током 40 мА наблюдается уменьшение размера карбидов. Наблюдается,что после облучения электронным пучком энергией 1,2 МэВ, током 25 мА в течение 9,6 сек увеличивается размеры карбидных частиц и по границам зеренкарбидных частиц образуется оксиды, за счет высокой температуры нагрева. Поскольку при высоких температурах происходят процессы коагуляции карбидов снижающих твердость [3]. Из РЭМ-изображении поверхности образцов, облученного электронным пучком энергией 1,3 МэВ, током 35 мА и энергией 1,2 МэВ, током 40 мА можно увидит структуру мелкоразмерных карбидных частиц. Известно [4], что с уменьшением размеров зерен карбидов износостойкость и твердость быстрорежущих сталей увеличиваются. Таким образом, можно утверждать, что повышение микротвердости и износостойкости связано с образованием на поверхности мелких карбидов.

Заключение

1. Экспериментально определено, что после электронно-лучевой обработки микротвердость быстрорежущей стали Р6М5 повышается до 950 МПа и износостойкость увеличивается в 1,3 раза по сравнению с исходным материалом.

2. Установлено, что электронно-лучевая обработка позволяет получить модифицированный слой с высокой твердостью и повышеннойстойкостью к абразивному износу. Значительное повышение микротвердости и износостойкости быстрорежущих сталей после электронно-лучевой обработки показывает перспективность применения этого способа обработки для повышения работоспособности режущих инструментов из быстрорежущих сталей.

Настоящая работа выполнена при финансовой поддержке Комитета науки МОН РК на 2015-2017 гг. по программе «Грантовое финансирование научных исследований».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лоладзе Т.Н. Прочность и износостойкость режущего инструмента / Т.Н. Лоладзе. М.: Машиностроение, 1982. – 320 с.
2. Высокоэнергетические процессы обработки материалов / О.П. Со-лоненко, А.П. Алхимов, В.В. Марусин, А.М. Оришич, Х.М. Рахимянов, Р.А. Салимов, В.Г. Щукин, В.Ф. Косарев. Новосибирск : Наука, 2000. - 425 с.
3. Гуляев А.П., Малинина К.А., Саверина С.М. Инструментальные стали: Справочник. М.: Машиностроение, 1975.- 272 с.
4. Фрезерное дело. Учебное пособие для средн. проф.-техн. училищ. Изд. 2-е. Барбашов Ф. А. \ Высшая школа - 1975 - 216 с.

ПРОВЕРКА УРАВНЕНИЯ СВЯЗИ В МЕТОДЕ ДВУХЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ АБСОРБЦИИ ДЛЯ РАЗЛИЧНЫХ ПАР ЭНЕРГИЙ

А.А. Семоненко

Научный руководитель: доцент, к.ф.-м.н. Н.А. Антропов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: Semonenko.a.a@gmail.com

BIOCOMPOSITES FOR BONE TISSUE REGENERATION

A.A. Semonenko

Scientific Supervisor: Asst. Prof., Dr. N.A. Antropov

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

E-mail: Semonenko.a.a@gmail.com

Abstract. *Determining the density and composition of multilayer material of variable composition is an important task for many industries. For example, in medicine in the diagnosis of osteoporosis, the analysed object is a bone surrounded by fat tissue. In customs control bulk cargo of mixed composition also represents multilayer materials of variable composition. To solve such problems, the methods based on the transmission of X-rays through material (X-ray transmission) are currently used. These methods include X-ray tomography and dual-energy X-ray absorption. However, these methods can give either a qualitative picture of the composition and density of multilayer material in the case of tomography or a quantitative one with a large error due to averaging the results of measurements across all layers, as in the case of dual-energy X-ray absorptiometry.*

Введение. Определение плотности и состава многослойных сред переменного состава является общей задачей для ряда отраслей. Например, в медицине при диагностике остеопороза анализируемый объект – кость в окружении жировых тканей представляет собой такую среду. Для решения таких задач в настоящее время используется методы, основанные на прохождении рентгеновского излучения через среды (рентгеновская трансмиссия). К ним относятся рентгеновская томография и двух энергетическая рентгеновская абсорбция. Однако названные методы могут дать либо качественную картину изменения состава и плотности многослойных сред в случае томографии, либо количественную с большой погрешностью вследствие усреднения результатов измерений по всем слоям, как в случае двух энергетической рентгеновской абсорбциометрии.

Материалы и методы исследования. В работе [1] было теоретически показано и экспериментально обосновано на примере линий ХРИ *K*α-линии серебра (22 кэВ) и *K*α-линии циркония (15.8 кэВ), что при прохождении двух пучков излучения с низкой и высокой энергиями через многоэлементную среду (образец) переменного состава зависимость между массовыми коэффициентами ослабления для этих энергий является линейной. Использование этого уравнения позволило значительно снизить погрешность измерения плотности сред переменного состава в сравнении с радиоизотопными плотномерами.

В настоящее время радиоизотопные плотномеры широко распространены в промышленности для определения плотности сред в технологических трубопроводах. При этом требования к снижению погрешности измерения плотности постоянно возрастают [2].

В данной работе для проверки были выбраны следующие изотопы: Европий-152 линии 122кэВ и 344кэВ и Титан-44 линии 68,9кэВ и 78,3кэВ. В качестве многокомпонентных сред переменного состава использовались водно-спиртовые растворы 6 образцов в диапазоне плотностей 0,81 – 0,996 , кг/м^3

Прохождении образца толщиной – х двумя моноэнергетическими пучками с учетом уравнения связи между массовыми коэффициентами ослабления μ можно описать следующей системой уравнений:

$$N' = N_0' e^{-\mu' \rho x}$$
$$N'' = N_0'' e^{-\mu'' \rho x}$$
$$\mu' = a + b\mu'' \quad (1)$$

Решение этих уравнений (1) относительно плотности дает следующее выражение:

$$\rho = K_1 ln \frac{N_0'}{N'} - K_2 ln \frac{N_0''}{N''} \quad (2)$$

Где:

$$K_1 = \frac{1}{b}, K_2 = \frac{a}{b}$$

В таблицах №1 и №2 представлены результаты измерений, где N' и N'' площадь пика после прохождения через раствор, N_0' и N_0'' – площадь пика после прохождения через пустую кювету.

Таблица 1

Результаты измерений с использованием Ti-44

	68,9 кэВ		78,3 кэВ		Массовые коэффициенты	
плотность, г/см^3	N'	N_0'	N''	N_0''	μ', см^2/г	μ'', см^2/г
0,81	42194	85587	56635	110667	0,873	0,827
0,9005	39493	85587	52040	110667	0,859	0,838
0,9245	38550	85587	50791	110667	0,863	0,842
0,9415	38120	85587	50401	110667	0,859	0,835
0,975	36762	85587	48932	110667	0,867	0,837
0,996	35814	85587	47829	110667	0,875	0,842

Массовые коэффициенты ослабления определялись из выражения:

$$\mu = \frac{1}{\rho} ln \frac{N_0'}{N'}$$

Как видно из графиков данные зависимости являются линейными. При определении плотности радиоизотопным плотномером по одной энергии погрешность измерения плотности будет определяться вариацией массового коэффициента ослабления используемой энергетической линии исследуемым образцом. Вариация коэффициента для титана линия 68,9кэв – 1.9%, линия 78,3 – 1.8%.

Таблица 2

Результаты измерений с использованием Ti-44

Известная плотность, г/см^3	Измеренная плотность, г/см^3	Погрешность, %
0,81	0,803	0,91
0,9005	0,900	0,03
0,9245	0,929	0,50
0,9415	0,939	0,28
0,975	0,974	0,02
0,996	1,003	0,68

Был построен графики зависимости μ' от μ" рис. № 1

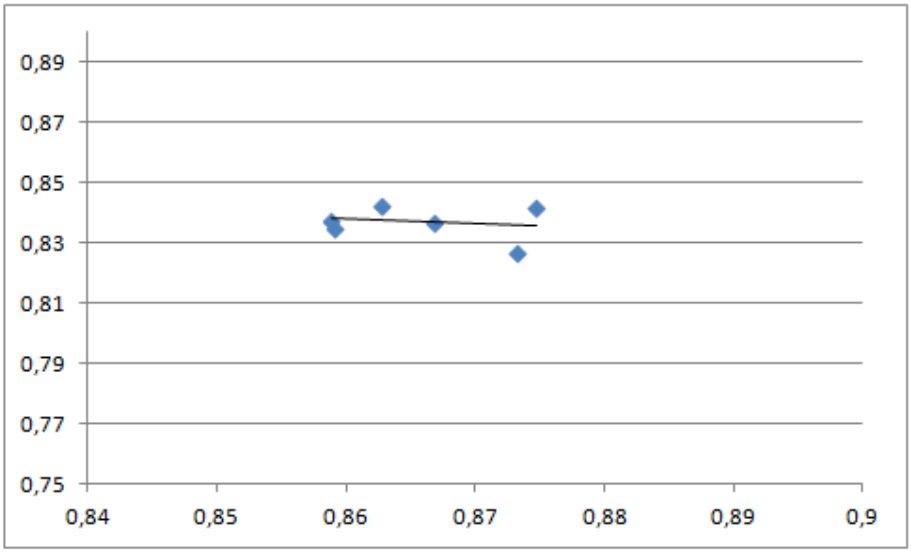


Рис. 1. Зависимость μ' от μ" для линий Ti-44

Как видно из таблиц плотности, вычисленные с использованием выражения (2) дают более, чем в два раза меньшую погрешность.

Заключение. Проведенные исследования показали использование метода ДЭРАС дает погрешность измерения плотности при прочих равных условиях более чем в два раза меньшую по сравнению с обычным радиоизотопным плотномером.

Данная работа проводится в рамках разработки поточного серомера-плотномера для измерения указанных параметров для товарной и сырой нефти в автоматическом режиме.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Assessment of the possibilities of the dual-energy X-ray absorptiometry of multicomponent samples with variable content. Antropov N.A., Karpov D.A., Kryuchkov Yu.Yu. Instruments and experimental techniques, 2012. Vol. 55, No. 5, pp. 608-610.
2. Радиоизотопный измеритель плотности и фазового состава нефти в магистральных нефтепроводах. Исаев Е.В. Труды международного форума по проблемам науки, техники и образования, М.: 2000. 103 с.

ЗАВИСИМОСТИ «НАПРЯЖЕНИЕ-ДЕФОРМАЦИЯ» ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ГЦК СПЛАВОВ И ЭВОЛЮЦИЯ ДИСЛОКАЦИОННОЙ СТРУКТУРЫ

Ю.Е. Сенцова, Л.И. Тришкина, Т.В. Черкасова, Н.А. Конева

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. Л.И. Тришкина

Томский архитектурно-строительный университет, Россия, г. Томск, пл. Соляная, 2, 634003

E-mail: setsova-1998@mail.ru

DEPENDENCES OF «FLOW STRESS –DEFORMATION » POLYCRYSTALS OF F.C.C. ALLOYS AND EVOLUTIONS OF DISLOCATIONS SUBSTRUCTURE

Y.E. Sentsova, L. I. Trishkina, T. V. Cherkasova, N. A. Koneva

Scientific Supervisor: Prof., Dr. L. I. Trishkina

Tomsk State University of Architecture and Building, Tomsk, Solyanaya Sq., 2, 634003

E-mail: setsova-1998@mail.ru

Abstract. *The paper is devoted to analysis of work hardening of Cu-Mn alloys. A comparison of work hardening stages of dislocation substructure. The comparison is performed out for the grain sizes 10 and 100 nm. It is determined that dependences of «flow stress (σ) –deformation (ε)» are consisted from three stages as a rule. The relations between the stages of stress train curves and types of dislocation substructure were determined with the appearance and the development of a definite type of the dislocation substructure.*

Введение. Зависимости «σ – ε» (σ – напряжение, ε – деформация) позволяют выявить характер изменения пластического течения материалов во время деформации, его стадийность, влияние содержания легирующего элемента и других параметров на закономерности этого процесса. Важным является установление взаимосвязи стадий упрочнения с изменением дислокационной структуры, формирующейся в процессе деформации. Процессы пластической деформации в поликристаллах характеризуются определенными стадиями [1, 2]. Стадии отличаются как величиной коэффициента деформационного упрочнения $\Theta = d\sigma/d\varepsilon$, так и его зависимостью от степени деформации.

В данной статье представлены результаты изучения зависимостей «σ – ε» и «Θ – ε» для малолегированных медно-марганцевых сплавов. Выявлено влияние степени деформации и размера зерна на формирование дислокационной субструктуры.

Материалы и методы исследования. Исследовались поликристаллические твердые растворы Cu-Mn со средним размером зерна (<d>) 10 и 100 мкм. Концентрация Mn в сплавах Cu-Mn изменялась в пределах 0.4…6 ат.%. Методика эксперимента описана в [3]. На основании полученных экспериментальных данных была изучена эволюция дислокационной структуры в зависимости от степени деформации и размера зерна. Средний размер зерна был измерен методом секущей [4].

Для изучения дислокационной структуры, формирующейся в сплавах с разным размером зерна, необходимо было провести по металлографическим изображениям измерение среднего размера зерна для всех исследованных сплавов.

Результаты. На рис.1 представлены изображение поверхности (а) исследуемого сплава Cu+0.4ат.%Mn и распределения размера зерен (б) при $\varepsilon_{ист}$ = 0.10. Из рисунка следует, что в сплавах наблюдаются области с большим и мелким размером зерна. Характер распределения является

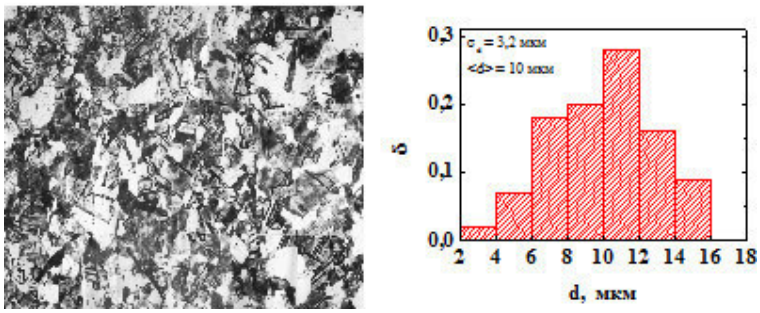


Рис.1. Металлографическое изображение поверхности металла (а) сплава Cu-0.4ат.%Mn при $\varepsilon_{ист}$ = 0.10 и распределение размера зерен (б) в этом сплаве

логарифмически нормальным. На рис.2 представлены зависимости напряжения течения и коэффициента деформационного упрочнения от степени деформации при комнатной температуре испытания для образцов с размером зерен <*d*> = 100 мкм для сплавов Cu+0.4ат.%Mn и Cu+6ат.%Mn. Для выделения стадий деформации были построены зависимости «θ – ε» (рис. 2). Анализ зависимостей «θ – ε» выявил наличие короткой переходной стадии π, стадию II и IV – с постоянным θ и стадию III – с уменьшающимся θ. Величина коэффициента деформационного упрочнения и напряжение течения выше в сплаве Cu+6ат.%Mn.

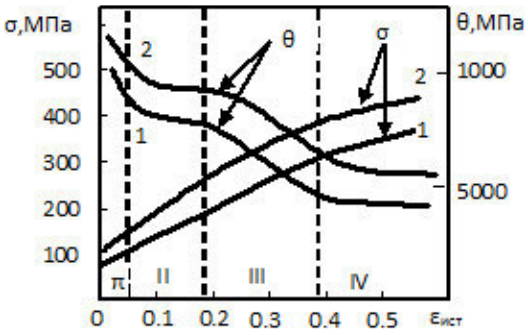


Рис. 2. Зависимости напряжения течения (σ) и коэффициента деформационного упрочнения (θ) от степени деформации (ε) для сплавов Cu+0.4ат.%Mn (1) и Cu+6ат.%Mn (2). Пунктирными линиями и римскими цифрами указаны стадии деформации

Рассмотрим эволюцию дислокационной субструктуры в процессе деформации. В сплавах Cu+0.4ат.%Mn и Cu+6ат.%Mn с самого начала пластической деформации формируется хаотическое распределение дислокаций (рис.3а), а затем при росте степени деформации – неразориентированная ячеистая ДСС (рис. 3б). Ячеистая дислокационная субструктура сначала является несовершенной: стенки ячеек не замкнуты и состоят из отдельных дислокаций, либо из дислокационных клубков. При $\varepsilon_{ист}$ = 0.10 начинают появляться разориентировки между соседними ячейками и образуется разориентированная ячеистая ДСС (рис.3в). Появляющиеся разориентировки свидетельствуют о начале поляризации дислокационной структуры, т.е. в стенках ячеек происходит накопление избыточной плотности дислокаций. Стенки ячеек теперь состоят из взаимодействующих дислокаций, но отдельные дислокации в сплетениях еще достаточно хорошо различаются. Одновременно происходит образование новых стенок ячеек, что в свою очередь приводит к уменьшению размера самих ячеек. С некоторого этапа развития ячеистой субструктуры дислокации из внутренней части ячейки уходят в стенки ячеек и ширина их увеличивается. Отметим, что не всегда происходит увеличение ширины стенок ячеек, например, в некоторых чистых металлах наблюдается противоположный процесс: с увеличением степени деформации стенки ячеек становятся более узкими [5-7]. При степени деформации ($\varepsilon_{ист}$ = 50) из разориентированной ячеистой происходит формирование микрополосовой ДСС (рис.3г). На электронно-микроскопических изображениях дислокационной субструктуры часто присутствуют деформационные изгибные экстинкционные контуры (рис.3в,г), свидетельствующие о наличии в кристалле непрерывных разориентировок [3]. В некоторых участках фольги наблюдаются оборванные субграницы (рис.3г).

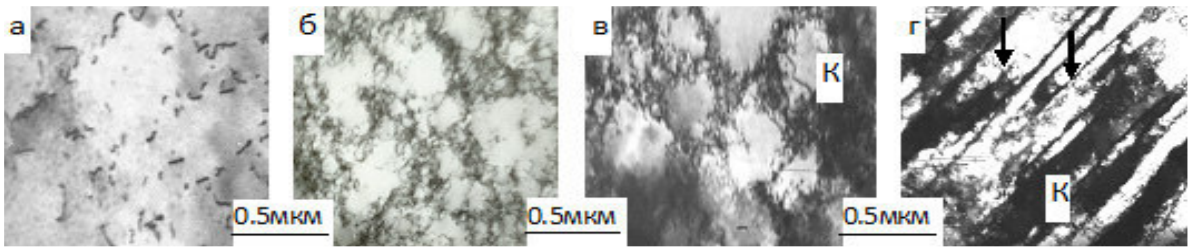


Рис. 3. Типы дислокационных субструктур, наблюдаемых в сплавах Cu + 0.4…6ат.% Mn после различных степеней деформации:
а – хаотическое распределение дислокаций, б – неразориентированная ячеистая ДСС,
в – разориентированная ячеистая ДСС, г – микрополосовая ДСС. Оборванные субграницы указаны стрелками. К – деформационные изгибные экстинкционные контуры. Размер зерна <d> = 100мкм

В сплавах Cu+0.4ат.%Mn и Cu+6ат.%Mn последовательность превращений ДСС с деформацией выглядит следующим образом: хаотическое распределение дислокаций → ячеистая ДСС без разориентировок → разориентированная ячеистая ДСС → микрополосовая. Размер зерен практически не влияет на формирование типов ДСС. Отличия наблюдаются лишь в количественных параметрах ДСС.

Заключение. Установлено, что во всех исследованных сплавах, с разными размерами зерен, деформированных до различных степеней деформации, наблюдаются четыре стадии пластической деформации переходная, с уменьшающимся коэффициентом деформационного упрочнения, стадия II – с высоким и почти постоянным θ, стадия III– с уменьшающимся θ и стадия IV – с постоянным, но низким значением θ.. На каждой стадии пластической деформации присутствует, как правило, два и более типа ДСС.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Конева Н.А., Козлов Э.В. Современная картина стадий пластической деформации //Изв. ВУЗов. Физика. – 2004. - №11. – С. 32-37.
2. Козлов Э.В., Тришкина Л.И., Жданов А.Н., Конева Н.А. Дислокационная структура и стадии пластической деформации в металлах и сплавах с разным размером зерен // XVII Петербургские чтения по проблемам прочности. Сб. материалов. Часть I. – Санкт-Петербург: ФТИ им. А.Ф. Иоффе, 2007. – С. 7-10.
3. Конева Н.А., Козлов Э.В Тришкина Л.И., Черкасова Т.В. Эволюция дислокационной структуры при деформации поликристаллических сплавов на основе меди и их пластичность //Фундаментальные проблемы современного материаловедения. Т. 13. № 2. – 2016. – С. 162-167.
4. Салтыков С.А. Стереометрическая металлография. – М.: Металлургия, 1970. – 376 с.
5. Хови А. //Прямое наблюдение несовершенств в кристаллах. – М.: Металлургия, 1964. –198-208.
6. Koneva N.A., Trishkina L.I., Kozlov E.V. Internal field sources, their screening and the flow stress// Mater. Sci. and Eng. – 2001. – A v. 319-321. – P.156-159.
7. Инденбом В.Л. Дислокационное описание простейших явлений пластической деформации // Некоторые вопросы физики пластичности кристаллов. – М.: Изд-во АН СССР, 1960. – С.117-158.

СРАВНЕНИЕ АЛГОРИТМОВ РАСЧЕТА ПОГЛОЩЕННОЙ ДОЗЫ В СИСТЕМЕ ПЛАНИРОВАНИЯ XIO ДЛЯ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ В КЛИНИЧЕСКОЙ ПРАКТИКЕ

М.А. Синягина[1,2], Е.С. Сухих[1,2]

Научный руководитель: старший преподаватель, к.ф.-м.н., Е.С. Сухих

[1]Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

[2] ОГАУЗ «Томский областной онкологический диспансер»

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

E-mail: sin-masha@mail.ru

COMPARISON ALGORITHMS OF DOSE CALCULATION FOR PLANNING SYSTEM XIO FOR USING IN CLINICAL PRACTICE

M. A. Sinyagina[1,2], E. S. Sukhikh[1,2]

Scientific Supervisor: assistant professor, PhD, E. S. Sukhikh

[1]Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

[2]Medical Physicist of State Regional Budget Health Care Institution "Tomsk Regional Oncology Center"

E-mail: sin-masha@mail.ru

Abstract. *External photon beam radiotherapy (EBRT)is widely used for effective treatment of malignant tumors.Since March 2015 EBRT (3D conformal radiotherapy (3DCRT)) has been started in Tomsk Regional Oncology Center using a linear accelerator Elekta Synergy and treatment planning system XIO. For creating an adequate treatment plan is needed the right choice dose calculation algorithm in the planning system. The purpose of this work is research and comparison of the results of absorbed dose simulation by different algorithms.*

Введение. С марта 2015 года на базе Томского областного онкологического диспансера проводится лучевая терапия с использованием аппаратов последнего поколения. Одним из таких является линейный ускоритель *Elekta Synergy*. Это аппарат, который используется для проведения наружной радиотерапии при злокачественных новообразованиях любых тканей и органов. На данный момент на линейном ускорителе осуществляется трехмерная конформная лучевая терапия (*3DCRT*) и лучевая терапия с модуляцией интенсивности (*I'mRT*).

При создании адекватных планов лечения в системе планирования *XiO* в клинической практике, т.е. скорость создания дозиметрического плана и точность расчета поглощенной дозы в гетерогенной среде (в пациенте), остро встает вопрос о выборе алгоритма расчета поглощённой дозы в планирующей системе. Поэтому целью данной работы было исследование и сравнение результатов расчёта поглощенной дозы с использованием всех имеющихся в системе планирования *XiO* алгоритмов, которые используются для соответствующих методик доставки дозы применяемых в клинической практике.

Для реализации данной цели было создано несколько планов лечения для методики доставки дозы *3DCRT*. Для выбранной анатомической области (предстательная железа) и методики облучения использовались несколько алгоритмов расчета поглощенной дозы (*Convolution* и *Superposition*). Далее была проведена верификация дозиметрических планов на линейном ускорителе Elekta Synergy с использованием тканеэквивалентного твердотельного фантома *I'mRT Phantom* с помощью

ионизационной камеры *CC*13 и клинического дозиметра *DOSE1*, а также проведено сравнение измеренных данных по поглощенной дозе с ионизационной камерой и расчетных данных поглощенной дозы в системе планирования *XiO*.

Экспериментальная часть. Для проведения исследований по сравнению алгоритмов расчета был выбран план облучения рака предстательной железы. Составление плана производилось по рекомендациям МКРЕ-62 [1] с семи полей. По рекомендациям мирового стандарта, для *3DCRT* необходимо доставить к планируемому объему мишени (*PTV*) не менее 90-95% от предписанной дозы и не более чем 107% от предписанной дозы. Оценка покрытия мишени производится по статистике гистограммы доза-объем (*DVH*).

При расчете плана облучения использовалось два алгоритма расчета поглощенной дозы. Алгоритм расчета *Convolution* более быстр в расчетах по сравнению с алгоритмом *Superposition*, но он не учитывает гомогенность среды. Для каждого поля облучения было вычислено количество мониторных единиц, все расчеты производились автоматически в системе планирования *XiO*.

Первичная оценка проводилась на суммарную дозу по процентному покрытию мишени. В результате чего для алгоритма *Superposition* 95%-ная изодоза покрывает 97,45% от всего объема мишени, а для алгоритма *Convolution* – 97,72%, «горячая» область в обоих вариантах не превышает 2%, что полностью удовлетворяет требованиям *Quantec* [2].На Рис. 1 представлен анатомический срез тела пациента с выделенной мишенью *PTV* и критическими органами, представлена геометрия пучков с изодозным распределением.

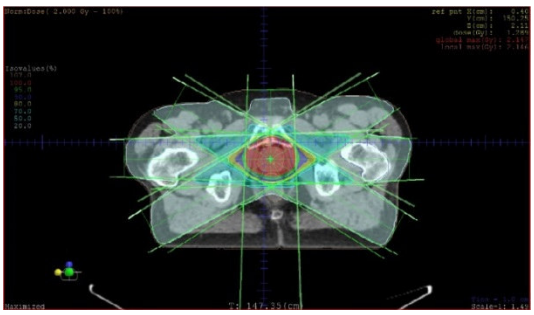


Рис. 1. Схема поперечного сечения анатомического среза тела пациента

Далее была проведена верификация планов лечения на тканеэквивалентом твердотельном фантоме *I'mRT Phantom* с учетом и без гомогенности среды. Для этого план реального пациента переносится на твердотельный фантом, с учетом разовой однократной дозы и количеством мониторных единиц для каждого пучка и для всего плана в целом. При использовании данного фантома может быть проведена только 1*D* верификация (измерение абсолютной величины поглощенной дозы), что позволяет определить поглощенную дозу только в активном объеме камеры.

Результаты.Следующим этапом проведения верификаци является реализация планов на линейном ускорителе. Для этого твердотельный фантом устанавливается на терапевтический стол имитируя тело пациента. Для абсолютных измерений поглощенной дозы использовался клинический дозиметр *DOSE*1 и ионизационная камера *CC*13. По результатам облучения получили значение заряда k_q.

В соответствии со стандартными условиями поглощенная доза определяется выражением:

$$D_W = k_{TP} * N_{DW} * Q * k_{Q,Q_0} * k_{pol} * k_s,$$

где Q- заряд;

$N_{DW} = 8{,}857 * 10^7 \mathrm{Gy/C}$ - калибровочный коэффициент ионизационной камеры;

k_{TP} - поправочный коэффициент для давления и температуры: $T = 21$℃, $P = 100{,}3$ кПа

$$k_{TP} = \frac{(273{,}2 + T)}{(273{,}2 + T_0)} * \frac{P_0}{P} = 1{,}03,$$

где T и P – это давление и температура в полости на момент измерений, T_0 и P_0 - стандартные значения (101,325 кПа и 20°C).

$k_{pol} = \frac{|M_+| + |M_-|}{2M}$ – коэффициент поляризации, где $M+$ и $M-$ показания электрометра, полученные при положительной и отрицательной полярности соответственно, а M показание электрометра, полученное при обычно используемой полярности (положительной или отрицательной);

$k_s = a_0 + a_1\left(\frac{M_1}{M_2}\right) + a_2\left(\frac{M_1}{M_2}\right)^2$ – коэффициент рекомбинации ионов, где константы a_i представлены в табл. 9 [*TRS*398, стр.61] для импульсного и импульсно-сканирующего излучений [3].

Результаты измеренной дозы представлены в Таблице 1.

Таблица 1

Результаты расчетов

Алгоритм	Твердотельный фантом		Твердотельный фантом с воздушной полостью	
	D_W, рассчитанное значение	D_W, измеренное	D_W, рассчитанное значение	D_W, измеренное
Superposition	2,200	2,200	2,480	2,470
Convolution	2,210	2,190	2,600	2,480

Выводы. Согласно полученным данным, по расчету поглощенной дозы для твердотельного фантома без воздушных полостей погрешность составила для алгоритма *Superposition* 0%, для алгоритма *Convolution* – 0,9%, что полностью удовлетворяет стандартам и международным протоколам. Допустимое значение погрешности для 3D конформной лучевой терапии составляет 2%. Так как тело человека нельзя считать полностью гомогенным, достовернее проводить верификацию планов лечения на твердотельном фантоме с воздушными полостями. Для алгоритма *Superposition* погрешность между полученными и измеренными данными составляет 0,41%, но для алгоритма *Convolution* составляет 4,83 %, это подтверждает нам то, что данный алгоритм не учитывает гетерогенность среды и его не следует использовать для расчета планов для определенного ряда опухолей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. ICRU Report 62, Prescribing, Recording and Reporting Photon Beam Therapy (Supplement to ICRU Report 50). - USA, 2010. - pp. 31-38.
2. Soren M. Bentzen, Louis S. Constine and etc., Quantitative analyses of normal tissue effects in the (QUANTEC): an introduction to the scientific. – Elsevier Inc, USA, 2010.
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.

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОРОШКОВОЙ СРЕДЫ НА ХАРАКТЕР РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ В ДВУМЕРНОЙ МОДЕЛИ В ПРОЦЕССАХ ЛАЗЕРНОЙ ОБРАБОТКИ МАТЕРИАЛОВ

П. В. Соболева

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. А. Г. Князева

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: piovere@rambler.ru

NUMERICAL INVESTIGATION OF INFLUENCE OF OPTICAL PROPERTIES OF POWDER MEDIUM ON THE CHARACTER OF DISTRIBUTION OF TEMPERATURE IN A TWO-DIMENSIONAL MODEL IN THE PROCESSES OF LASER PROCESSING OF MATERIALS

P. V. Soboleva

Scientific Supervisor: Prof., Dr. A. G. Knyazeva

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

E-mail: piovere@rambler.ru

Abstract. *Numerically investigated the influence of the optical properties of a powder medium on the character of the temperature distribution in a two-dimensional system in the processes of laser processing of materials. A computer program has been developed, on the basis of which results have been obtained that allows estimating the temperature distribution over the plate thickness. As a result, was plotted the dependence of the maximum temperature on the reflection coefficient as a function of the value of the absorption coefficient along the X and Y axes.*

Введение. Изучению оптических свойств порошков металлов посвящен некоторый ряд работ, например [1–3]. Лазерное воздействие на порошковые среды встречается во многих процессах, например, лазерное спекание, ионная обработка и в последнее время все чаще применяется в машиностроении для изготовления сложных деталей или медицине для изготовления протезов и имплантатов, и т.д. Экспериментальное определение оптимальных параметров обработки затруднительно в силу наличия большого числа управляющих параметров процесса. От этих параметров зависит будущий тип структуры, размер ее элементов и свойства получаемого материала [4]. В связи с этим актуальной является разработка математических моделей, позволяющих исследовать роль разных факторов.

Целью работы является численное исследование влияния оптических свойств порошковой среды на характер распределения температуры в процессе лазерной обработки материалов.

Материалы и методы исследования. Для решения поставленной задачи была сформулирована двумерная модель с движущимся источником тепла. Образец представляет собой пластину толщиной h_A с высокой теплопроводностью и с покрытием толщиной h_B. В результате математическая постановка задачи будет иметь вид:

$$c_A\rho_A\frac{\partial T_A}{\partial t}=\lambda_A\left(\frac{\partial^2 T_A}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 T_A}{\partial y^2}\right)$$

$$c_B\rho_B\frac{\partial T_B}{\partial t}=\lambda_B\left(\frac{\partial^2 T_B}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 T_B}{\partial y^2}\right)+(1-f_B)q_0\sigma_B\exp(-\sigma_B h_B)\exp\left[-\left(\frac{X-Vt}{a}\right)^2\right]$$

Граничные и начальные условия можно записать следующим образом:

$$x=0,\ x\to\infty,\ \frac{\partial T}{\partial x}=0;\ t=0,\ T=T_0$$

$$y=0:\ \lambda_B\frac{\partial T_B}{\partial y}=\sigma\varepsilon(T^4-T_B^4)=0,.$$

$$y=h_A:\ \lambda_A\frac{\partial T_A}{\partial y}=\lambda_B\frac{\partial T_B}{\partial y}=(1-f_B)q_0\sigma_B\exp(-\sigma_B h_B)\exp\left[-\left(\frac{X-Vt}{a}\right)^2\right],$$

$$y=h_A+h_B:\ T_A=T_B,\ \frac{\partial T_A}{\partial y}=0.$$

Здесь ρ_A, ρ_A – плотность, c_A, c_B – удельная теплоемкость, λ_A, λ_B – коэффициент теплопроводности, σ_B – показатель поглощения, f_B – коэффициент отражения, a – эффективный радиус луча, X – пространственная координата, V – скорость луча вдоль поверхности, t – время, h_B – толщина порошка, h_A – толщина пластины, где σ – постоянная Стефана; ε – степень черноты.

В расчетах были выбраны в качестве материала подложки сталь3, а материала покрытия – порошок железа, которые характеризуются следующими свойствами:

c_A=502 Дж/(кг·К), c_B=450 Дж/(кг·К), λ_A= 55 Вт/(м·К), λ_B=92 Вт/(м·К), ρ_A= 7800 кг/м^3, ρ_B=7874 кг/м^3, T_0=300 К, T_w=300 К, σ_B=20…200, f_B=0,3…0.9, a=0,01 см, V=0,2 см/с, h_A=0,001 мм, h_B=0,001 мм, ε_0=0,5 , σ=5,67e-12 Вт·м$^{-2}$·К$^{-4}$.

Результаты. Задача была решена численно. Использована неявная разностная схема и метод прогонки [5]. Составлена программа на языке Fortran. В ходе вычислений изменялись показатели поглощения σ_B и коэффициент отражения f_B, а также скорость движения луча.

Типичное распределение температуры в для разных f_b показано на рис.1,2:

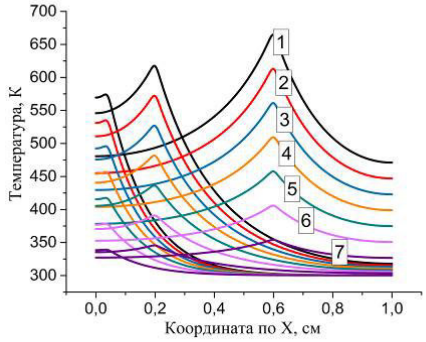


Рис. 1. Распределение температуры для разных значений показателя поглощения вдоль оси X при: σ_B=20; 1 - f_b=0,3; T=664; 2 - f_b=0,4; T=613; 3 - f_b=0,5; T=561; 4 - f_b=0,6; T=509; 5 - f_b=0,7;

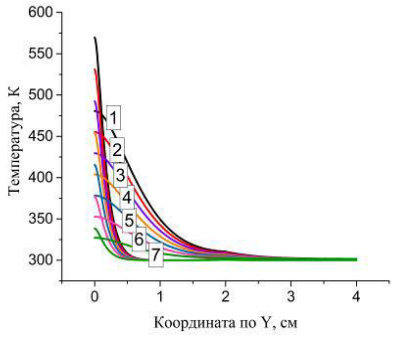


Рис. 2. Распределение температуры для разных значений показателя поглощения вдоль оси Y при: σ_B=20; 1 - f_b=0,3; T=569; 2 - f_b=0,4; T=530; 3 - f_b=0,5; T=493; 4 - f_b=0,6; T=454; 5 - f_b=0,7;

T=457; 6 - f_b=0,8; T=404; 7 - f_b=0,9; T=354. *T=415; 6 - f_b=0,8; T=377; 7 - f_b=0,9; T=338.*

Первая группа кривых на рис. 1 соответствует нестационарной стадии и моменту времени t=0,2 сек., другие группы кривых моментам времени t=3,0 и t=10,0 сек.

По результатам расчетов построены зависимости максимальной температуры от параметров модели. Зависимости максимальной температуры от коэффициента отражения при постоянных значениях показателя поглощения показаны на рис. 3 и рис. 4.

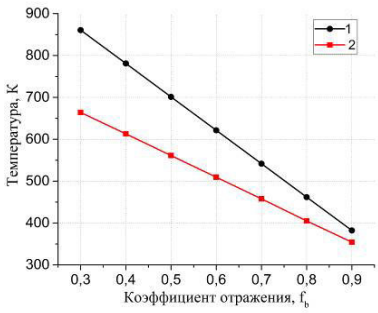


Рис. 3. Зависимость максимальной температуры от коэффициента отражения f_b по оси X для разных значений показателя поглощения σ_B; σ_1=20; σ_2=200.

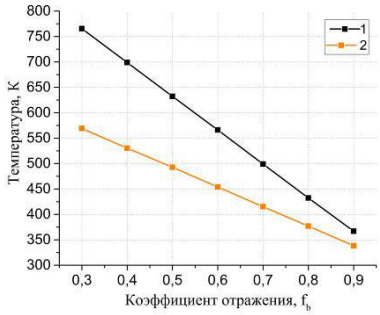


Рис. 4. Зависимость максимальной температуры от коэффициента отражения f_b по оси Y для разных значений показателя поглощения σ_B; σ_1=20; σ_2=200.

Из графиков (Рис.3, Рис.4) видно, что при изменении f_b от 0,3 до 0,9 максимальная температура уменьшается. Также при изменении значения показателя поглощения σ_B от 20 до 200 температура в целом увеличивается при соответствующих значениях коэффициента отражения f_b.

Заключение. В работе представлена двухмерная модель лазерной обработки, в которой учитывается поглощение излучения в объеме по закону Ламберта-Бугера. Численно исследовано влияние оптических свойств порошковой среды на характер распределения температуры. В результате можно сделать вывод, что изменения показателей отражения и поглощения, которые зависят от вида порошка и способа его предварительной обработки, значительно влияют на распределение температуры.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гейнц Ю.Э., Землянов А.А., Панина Е.К. // Изв. вузов. Физика. 2010. Т. 53. № 4. С. 76–85.
2. Светличный В.А., Лапин И.Н. // Изв. вузов. Физика. 2013. Т. 56. № 5. С. 86–91.
3. Звеков А.А., Каленский А.В., Никитин А.П. и др. Моделирование распределения интенсивности в прозрачной среде с Френелевскими границами, содержащей наночастицы алюминия // Компьютерная оптика. – 2014. – Т. 38. – № 4. – С. 749-756.
4. Харанжевский Е.В., Костенков С.Н. // Вестник Удмуртского университета. Сер. Физика. Химия. - 2012. - Вып. 3.-С. 33-43.
5. Knyazeva A.G. Introduction to difference methods of solution of thermal conductivity problems with examples. Part 1. – Tomsk: S-print Publishing House, 2015.

ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМА РАСПРОСТРАНЕНИЯ НИЗОВОГО ЛЕСНОГО ПОЖАРА С ПОМОЩЬЮ ЧИСЛЕННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Э. Сопруненко

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

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: soprunenko.elina@yandex.ru

STUDY OF THE SPREAD MECHANISM OF GROUND FOREST FIRE USING THE NUMERICAL EXPERIMENT

E. Soprunenko

Scientific Supervisor: Prof., Dr. Sci. (Phys.–Math.). V.A. Perminov

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

E-mail: soprunenko.elina@yandex.ru

Abstract. *One of the models of the ground forest fire, which is of great practical importance, is the model of the spread of a ground fire through a layer of forest combustible material. When assessing fire hazard, the properties of forest combustible materials, meteorological conditions are taken into account. The speed of the wind and the moisture content of the forest combustible material are of decisive importance for the assessment and analysis of the existing situation, and also for forecasting. To obtain an adequate mathematical model and a successful formulation of a numerical experiment, a full and correctly described physical model of a forest fire plays a decisive role, taking into account those of its mechanisms that play a decisive role.*

Введение. Полноценное экспериментальное исследование распространения фронта лесного пожара в натурных условиях трудноразрешимо, вследствие плохой воспроизводимости результатов измерений, и их зависимости от определенных внешних условий. Цель данной работы состоит в изучении механизма распространения низового лесного пожара (НЛП) с помощью численного эксперимента. Особое внимание в данной работе уделено физической постановки задачи и ее роли при получении адекватной модели.

Постановка задачи. Полноценная физическая модель ложится крепким фундаментом в постановку успешного численного эксперимента. Модельное описание зоны пожара следующие: часть природной среды, внутри которой термодинамические параметры отличаются от равновесных значений вследствие изменения температуры и состава окружающей среды при физико-химических превращениях во фронте пожара. Эти параметры модельных расчетов главным образом определяются погодными условиями и типом растительности [1]. Согласно [2] основные стадии горения с соответствующими температурными диапазонами при пожаре включают в себя: сушку (333К $\leq$T<600K), пиролиз (600 К $\leq$T<1100 K) и горение (T $\geq$ 1100 K, W< 0.15; z >1.2 $[\frac{кг}{м^2}]$).

При осуществлении данного численного эксперимента предполагается, что:

1) течение носит развитый турбулентный характер и молекулярным переносом пренебрегаем по сравнению с турбулентным; 2) плотность газовой фазы не зависит от давления из-за малости скорости

течения по сравнению со скоростью звука; 3) среда находится в локально-термодинамическом равновесии; 4) известна скорость ветра; 5) газодисперсная смесь бинарная и состоит из частиц конденсированной фазы, а также газовой фазы – компонентов кислорода, газообразных горючих и инертных компонентов. Математически данная задача сводится к решению системы дифференциальных уравнений на основе общей математической модели[1].

Модель распространения огня через слой хвои при различных внешних условиях была создана на основе модели, описанной в работе [1] с добавлением модели турбулентности k-e RNG с турбулентным горением, модели переноса излучения, учетом коэффициентов обмена фаз и сопротивления через объемные доли фаз. При проведении расчетов в программно-вычислительном комплексе [3] размеры области низового лесного пожара и внешние условия были взяты из работы [4]. Лесной горючий материал (ЛГМ) представлен слоем опавшей хвои толщиной 0.017 м и размером 0.5 × 0.2 м, площадка с полосой зажигания ориентирована по направлению скорости ветра. Скорость ветра изменялась в диапазоне 0.1 – 0.185 м/с, влагосодержание лесного горючего материала составляло 3%. Данные получены во временном интервале 60 секунд с начала распространения заданного фронта низового пожара. Из полученных ранее данных [5] видно, что после 60–70 секунд движения фронта пламени, горение выходит на устойчивый режим распространения. На рисунке 1 показана схема рассматриваемой области низового пожара, где ось x совпадает с направлением ветра и задается на правой границе области.

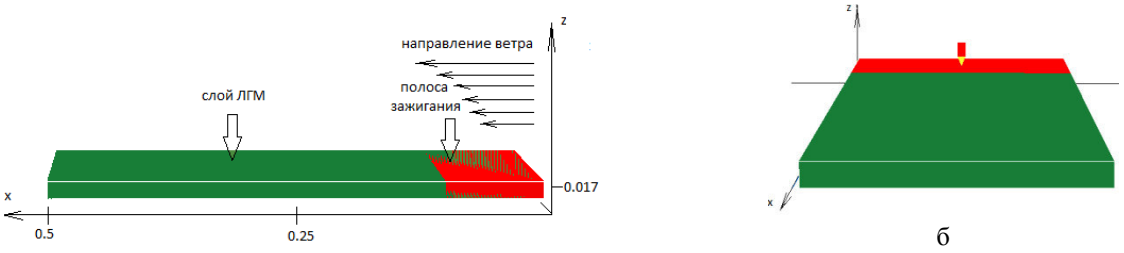


Рис. 1. Рассматриваемая модель низового лесного пожара (а – вид сбоку, б – вид спереди)

Таблица 1

Изменение температуры при распространении НЛП в различные моменты времени в слое и над слоем ЛГМ

z, м (высота слоя ЛГМ)	**t, сек при v = 0.1 м/с**		
	4	*30*	60
В слое ЛГМ, при z=0 м.	550 К ≤T<600K	380 К ≤T<900K	400 К ≤T<900 К
Над слоем ЛГМ, при z=0.017 м.	500 К ≤T<600K,	730 К ≤T<900 К	700 К ≤T< 900 К
z, м	**t, сек при v = 0.135 м/с**		
	4	*30*	*60*
В слое ЛГМ, при z=0 м.	*550 К ≤T<600K*	*350K ≤T<900K*	*400 К ≤T<820 К*
Над слоем ЛГМ, при z=0.017 м.	*450K≤T<600K,*	*700K ≤T<830K*	*600 К ≤T< 710 К*
z, м	**t, сек при v = 0.185 м/с**		
	4	*30*	*60*
В слое ЛГМ, при z=0 м.	*500 К ≤T<600 К*	*380K ≤T< 850 К*	*380 К ≤T< 870 К*
Над слоем ЛГМ, при z=0.017 м.	*450 К≤T<600 К*	*600 К ≤T< 720 К*	*550 К ≤T< 730 К*

Исходя из полученных данных можно сделать выводы об условиях протекания различных стадий горения (Таблица 1):

1. В первые 30 секунд начала горения температура выше в слое ЛГМ, что можно объяснить охлаждением верхней части за счет конвективного тепломассобмена с течением над слоем ЛГМ. С течением времени, в интервале 30-60 сек температуры над слоем ЛГМ увеличиваются, что связано с увеличением времени прогрева.

2. С увеличением скоростей ветра в диапазоне значений 0.1 – 0.185 м/с, наблюдается снижение температур, как в слое, так и над слоем ЛГМ на трех выделенных временных интервалах (0-4; 4-30 и 30-60 сек), что связано с увеличением скорости распространения фронта НЛП и как следствие, сокращением времени прогрева ЛГМ, эти данные согласуются с данными эксперимента в работе [4]: с увеличением скорости ветра от 0.1 до 0.185 м/с уменьшается максимальная температура во фронте пламени и растет ширина зоны пламени..

3. Временной интервал до 30 секунд включает сушку и нагрев ЛГМ до температуры начала разложения (пиролиза), температура этой стадии: 550 К $\leq T < 600$K. После 30 секунд происходит воспламенение газов с температурами 380К $\leq T < 900$K и пламенное горение, которое сопровождается выделением углекислого газа, водяных паров и несгоревших газов и с более высоким температурами 700 К $\leq T <$ 900K.

Выводы. Результаты численных экспериментов типовых сценариев НЛП на основе полноценных физических моделей могут служить эффективным инструментом для поддержки и принятия управленческих решений при прогнозировании распространения лесного пожара. Также они могут быть использованы для расчета запаса времени принятия противопожарных мер при угрозе объектам социальной инфраструктуре и для создания моделей тактического уровня.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гришин А. М. Математические модели лесных пожаров и новые способы борьбы с ними. – Новосибирск: Наука, 1992. – 408 с.
2. Ходаков В.Е., Жарикова М.В. Лесные пожары: методы исследования. – Херсон: Гринь Д.С., 2011. – 470 с.
3. CHAM PHOENICS Your Gateway to CFD Success [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://www.cham.co.uk/ – 10.11.2014 г.
4. Терещенко А.Г., Коробейничев О.П., Палецкий А.А., Шмаков А.Г., Чернов А.А. Скорость и структура пламени при его распространении по слою хвои в зависимости от скорости ветра//XX Всероссийская научная конференция с международным участием «Сопряженные задачи механики реагирующих сред, информатики и экологии», г. Томск, 21-23 сентября 2016 г.: Изд-во ТГУ, 2016. – Т.1 – С.55-57.
5. Сопруненко Э. Е. Моделирование распространения фронта низового пожара при различных внешних условиях / Э. Е. Сопруненко; науч. рук. В. А. Перминов // Перспективы развития фундаментальных наук: сборник научных трудов XIII Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых, г. Томск, 26-29 апреля 2016 г.: в 7 т. — Томск: Изд-во ТПУ, 2016. — Т. 3: Математика. — [С. 102-104].

ВЛИЯНИЕ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА ЭФФЕКТ ПАМЯТИ ФОРМЫ В КРИСТАЛЛАХ СПЛАВА $Ni_{50,2}Ti_{37,3}Hf_{12,5}$

Н.Ю. Суриков, А.И. Тагильцев.

Научные руководители: д.ф.-м.н., доц. Е.Ю. Панченко, д.ф.-м.н., профессор Ю.И. Чумляков

Сибирский физико-технический институт Томского государственного университета,

Россия, г. Томск, пл. Новособорная,1, 634050

E-mail: jet_n@mail.ru

THE EFFECT OF THERMOMECHANICAL TREATMENT ON THE SHAPE MEMORY IN HETEROPHASE $Ni_{50,2}Ti_{37,3}Hf_{12,5}$ ALLOYS

N.Yu. Surikov, A.I. Tagiltsev.

Scientific Supervisors: Assist. Prof., Dr. E.Yu. Panchenko, Prof., Dr. Yu.I. Chumlyakov

Siberian Physical Technical Institute of Tomsk State University, Russia,

Tomsk, Novosobornaya sq., 1, 634050

E-mail: jet_n@mail.ru

Abstract. *In this work the high-temperature shape memory effect was investigated in $Ni_{50,2}Ti_{37,3}Hf_{12,5}$ alloys aged in austenite at 773 K 3h with/without an additional holding in the martensitic state under stress. It was experimentally shown, that the additional stress-holding in the martensitic state leads to the stabilization of stress-induced martensite, heavy increasing of reverse martensitic transformation start temperature A_S^σ on 30 K, and gain of the reversible strain from 1,8% to 2,3% as compared with the aged alloys.*

Введение. Одним из актуальных направлений развития материаловедения является разработка высокопрочных «умных» материалов, испытывающих термоупругие B2–B19' мартенситные превращения (МП) с проявлением функциональных свойств – эффекта памяти формы (ЭПФ) и сверхэластичности. В данной работе исследуются гетерофазные поликристаллы никелида титана, легированного атомами Hf, обладающие эффектом памяти формы. Эти сплавы испытывают МП при высоких внешних напряжениях свыше 1000 МПа и высоких температурах до 800 К, что позволяет использовать данные материалы для решения более широкого спектра практических задач [1]. За счет различных режимов термических и термомеханических обработок, при выделении дисперсных частиц вторичных фаз, не испытывающих МП, существует возможность управления основными характеристиками функциональных свойств этих сплавов [1, 2]. В данной работе целью является изучения влияния выбранных термических и термомеханических обработок на эффект памяти формы в гетерофазных поликристаллах сплава $Ni_{50,2}Ti_{37,3}Hf_{12,5}$.

Материалы и методы исследования. Поликристаллы сплава номинального состава $Ni_{50.2}Ti_{37.3}Hf_{12.5}$ (ат. %) произведены путем плазменно-дуговой плавки. Микроструктура изучена на просвечивающем электронном микроскопе JEOL JEM-2100 в ЦКП ИФПМ СО РАН «НАНОТЕХ» с ускоряющим напряжением 200 кВ и оптическом микроскопе Keyence VHX-2000. Изобарические циклы нагрев/охлаждение под действием постоянных сжимающих напряжений проведены на дилатометре ИМРС-1.

Поликристаллы $Ni_{50,2}Ti_{37,3}Hf_{12,5}$ исследовались в двух состояниях: 1) старение при T = 773 К, 3ч в аустенитном состоянии (ТО); 2) старение при T = 773 К, 3ч в аустенитном состоянии с дополнительной

выдержкой в мартенситном состоянии при T = 373 K 1ч под нагрузкой (ТМО). Предположительно, выдержка в мартенситном состоянии под нагрузкой должна стабилизировать мартенситную фазу.

Результаты. В кристаллах после ТО и ТМО средний размер зерна составляет 30 мкм. Микроструктура поверхности образца представлена на Рис. 1 а. С помощью рентгеновских и электронно-микроскопических исследований с использованием энергодисперсионного анализатора установлен химический состав полученных кристаллов $Ni_{50,4}Ti_{37,3}Hf_{12,3}$ (ат.%), который с учетом погрешности ± 0,5 % близок к номинальному. На светлопольном изображении обнаружены области, обогащенные по Hf вплоть до 91 % (Рис. 1 б), не растворенные в материале при плавке.

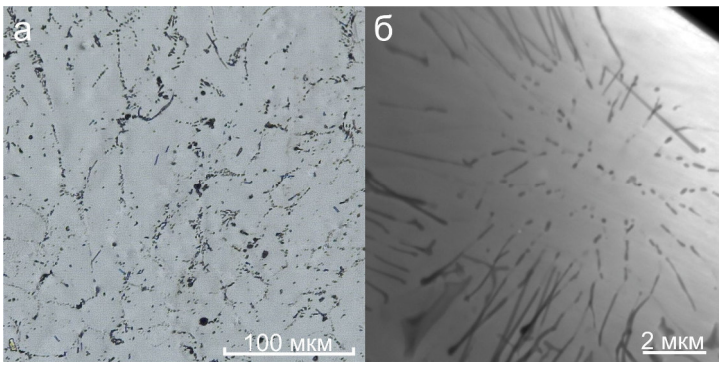


Рис. 1. Структура поликристаллов $Ni_{50,2}Ti_{37,3}Hf_{12,5}$; а – оптическая микроскопия поверхности; б – электронно-микроскопическое светлопольное изображение.

Эффект памяти формы исследовали при постоянной нагрузке в циклах нагрев/охлаждение (Рис. 2 а). Изменение размеров образца при термоциклировании в свободном состоянии (двойной эффект памяти формы) не наблюдается в обоих состояниях аналогично монокристаллам NiTiHf [2, 3]. Напряжения, необходимые для роста ориентированного варианта мартенсита и появления обратимой деформации, связанной с мартенситным превращением в состояниях ТО и ТМО близки и составляют 25 МПа. В поликристаллах $Ni_{50,2}Ti_{37,3}Hf_{12,5}$ после ТО и ТМО наблюдается высокотемпературный ЭПФ. Характеристические температуры B2-B19′ МП (M_s^σ, A_f^σ) находятся в температурном интервале от 350 K до 450 K. С ростом напряжений обратимая деформация в кристаллах после ТМО увеличивается на большую величину, чем в состоянии ТО (Рис. 2 б), что говорит о снижении сопротивления ориентированному росту кристаллов B19′-мартенсита. ЭПФ в состоянии ТМО протекает, в основном, с отсутствием необратимой деформации, в то время как при ТО необратимая деформация достигает 0,2 %. Величина ЭПФ в циклах нагрев/охлаждение при 400 МПа достигает 1,8 % и 2,3 % в состояниях ТО и ТМО, соответственно.

Несмотря на стабилизацию мартенситного состояния, при термомеханической обработке ТМО, температуры M_s^σ и A_f^σ начала прямого и конца обратного МП практически не изменяются. Однако при ТМО наблюдается значительный рост температуры A_S^σ начала обратного МП (Рис. 2 а), что свидетельствует о стабилизации мартенсита напряжений [4]. ТМО также приводит к изменению характера превращения: уменьшается сопротивление росту ориентированного варианта мартенсита за счет перераспределения точечных дефектов в материале в соответствии с симметрией моноклинного B19'-мартенсита. Это приводит к увеличению обратимой деформации и уменьшению температурных интервалов МП на 40 K по сравнению с состаренными сплавам после ТО. Как видно из Рис. 2 а в поликристаллах после ТМО B2-B19′ МП прямое и обратное МП протекает в узких температурных

интервалах и приобретает черты взрывного превращения. Поэтому вполне можно ожидать, что состаренные с дополнительной выдержкой в мартенсите кристаллы будут обладать эффектом сверхэластичности в отличие от поликристаллов после ТО, которые не проявляют СЭ поведения.

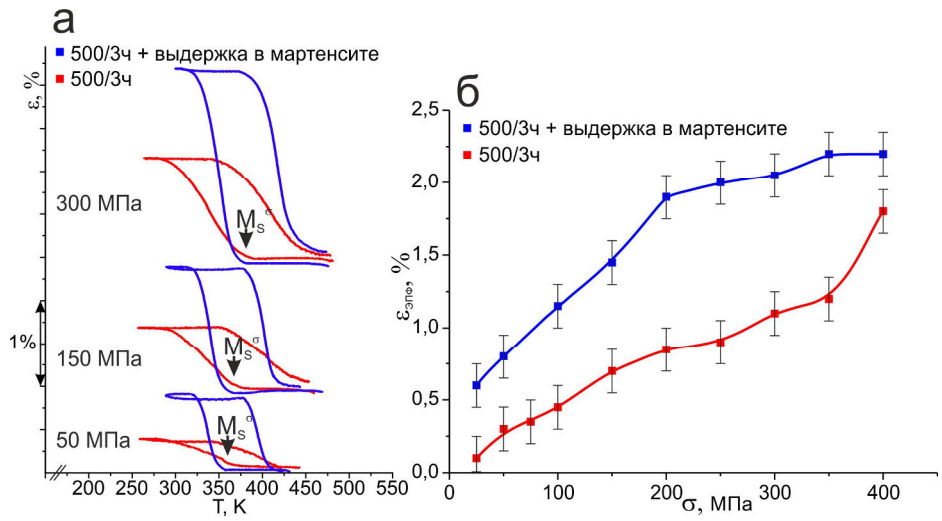


Рис. 2. Эффект памяти формы в поликристаллах $Ni_{50,2}Ti_{37,3}Hf_{12,5}$; а – кривые «деформация – температура»; б – зависимость величины ЭПФ от приложенного напряжения.

Заключение. Экспериментально установлено, что предложенная в настоящей работе термомеханическая обработка (старение 773 К 3ч с дополнительной низкотемпературной выдержкой в мартенситном состоянии при Т = 373 К 1ч под нагрузкой) позволяет эффективно управлять характеристиками высокотемпературного эффекта памяти формы в кристаллах сплава $Ni_{50,2}Ti_{37,3}Hf_{12,5}$, а именно: приводит к появлению взрывного характера B2-B19′ МП, увеличению величины эффекта памяти формы с 1,8 % до 2,3 %, увеличению температур A_S^σ на 30 К и стабилизации мартенсита напряжений.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ 14-29-00012.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. G.S. Firstov, J. Van Humbeeck et al. Comparison of high temperature shape memory behavior for ZrCu-based, Ti–Ni–Zr and Ti–Ni–Hf alloys. // Scripta Materialia. – 2004. – № 50. – P. 243–248.
2. H.E. Karaca, S.M. Saghaian et al. Effects of nanoprecipitation on the shape memory and material properties of an Ni-rich NiTiHf high temperature shape memory alloy // Acta Materialia. – 2013. – №61. – P.7422–7431.
3. N. Y. Surikov, A. S. Eftifeeva et al. Stress-induced martensitic transformation in high-strength [236]-oriented $Ni_{51}Ti_{36.5}Hf_{12.5}$ single crystals. // IOP Conf. Series. – 2015. – № 93. – p. 012047.
4. K. Otsuka, X. Ren. Mechanism of martensite aging effects and new aspects. // Materials Science and Engineering. – 2001. – № A312. –P. 207–218.

ИССЛЕДОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ КЛИНИЧЕСКОГО ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА В ТКАНЕЭКВИВАЛЕНТНОЙ СРЕДЕ ДЛЯ ТЕРАПЕВТИЧЕСКИХ УСКОРИТЕЛЕЙ РАЗНОГО ТИПА

Я.Н. Сутыгина, Е.С. Сухих,
Научный руководитель: ст. препод., 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

RESEARCH THE DESTRIBUTION OF CLINICAL ELECTRON'S BEAM IN TISSUE-EQUIVALENT ENVIRONMENT FOR DIFFERENT TYPES OF THERAPEUTIC ACCELERATORS

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. *Presents the results of the relative dosimetry of the extracted betatron electron beam by means of polymer films in a tissue equivalent medium, the dosimetry of the electron beam of the Elekta Synergy linear accelerator, and the creation of a beam model in the PLUNC program.*

Введение. В современной онкологии успешно развивается метод интраоперационной лучевой терапии (ИОЛТ) - технически сложный метод лечения рака однократной высокой дозой ионизирующего излучения (10-20 Гр), когда доступ к опухоли обеспечивается хирургическим путем и облучается либо сама опухоль, либо ложе удаленной опухоли. Благодаря своим свойствам пучок быстрых электронов является наиболее оптимальным источником для данной терапии. Высокая терапевтическая эффективность электронной терапии, способность обеспечить летальное повреждение большего числа опухолевых клеток, снижающееся за счет фракционирования, возможность создания концентрации дозы на заданной глубине с резким ее падением за пределами мишени обеспечивают существенные преимущества ИОЛТ перед наружным облучением. Одной из важнейших проблем, мешающих широкому внедрению интраоперационного облучения в клиническую практику, является техническое обеспечение ИОЛТ. В зарубежный странах для ИОЛТ используют электронный пучок от линейных ускорителей, в России электронный пучок бетатронов, т.к лечебные учреждения не располагают достаточным количеством линейных ускорителей для ИОЛТ из-за высокой стоимости. В последние годы в НИИ интроскопии при томском политехническом университете созданы малогабаритные бетатроны для ИОЛТ с фиксированной энергией пучка на основе серийно выпускающегося бетатрона, которые не имеют аналогов в мире среди ускорителей для данной терапии. В настоящее время разрабатывается источник электронного излучения на основе модернизированного бетатрона с переменной энергией выведенного пучка. Бетатрон удачно сочетает экономические и технологические достоинства,

проявляющиеся в относительной дешевизне ускорителя, простоте его эксплуатации и в достаточно высокой мощности поглощенной дозы в терапевтическом электронном пучке.

Первостепенной задачей лучевой терапии является соблюдение основного радиотерапевтического принципа: максимальное повреждающее действие на опухоль и уменьшение лучевой нагрузки на окружающие здоровые ткани. Поэтому для оптимального лечения доза излучения должна доставляться с высокой точностью и как можно более равномерна (не ниже -5% и не выше +7%), однако это требование не всегда выполнимо по техническим причинам [1]. В связи с этим, расчет планов облучения осуществляется с использованием специальных программ. Одной из таких программ является образовательная система планирования PLUNC. Данная система планирования позволяет создавать планы лечения для дистанционной лучевой терапии (ДЛТ) пучком фотонов с энергией 6 и 15 МэВ, а также существует возможность создавать модели фотонных и электронных пучков излучения линейных ускорителей на основе измеренных дозиметрических данных. Для успешного ввода в эксплуатации нового бетатрона ИОЛТ необходимо провести клиническую дозиметрию пучка, а также разработать модель пучка для дальнейшего планирования ИОЛТ. Так как программа PLUNC используется только для ДЛТ, поэтому изначально необходима проверка созданной модели электронного пучка линейного ускорителя Elekta Synergy и верификация на этом аппарате. А затем уже измерение дозиметрии электронного пучка бетатрона, создание его модели и верификация.

Материалы и методика исследований. С помощью пленки проведена относительная дозиметрия выведенного электронного пучка с энергией от 1.5 до 2.5 МэВ. Измерения глубинных распределения и поперечных профилей электронного пучка выполнены с помощью тканеэквивалентной полимерной плёнкой GAFROMIC EBT [2], которая укладывалась в твердотельный фантом для имитации тела пациента. Оптическая плотность считывалась цветным планшетным сканером Epson Perfection V750 Pro. С помощью плоскопараллельной ионизационной камеры проведена относительная дозиметрия выведенного электронного пучка линейного ускорителя Elekta Synergy с энергией 6 и 9 МэВ для ряда конусов: 21×21 см, 14.8×14.8 см, 10.4×10.4 см и 6.2×6.2 см. Все измерения характеристик электронного пучка выполнены с использованием водного фантома.

Результаты исследований. На рисунке 1 представлено двумерное распределение оптической плотности, которые получены для пучка с энергий 2.5 МэВ.

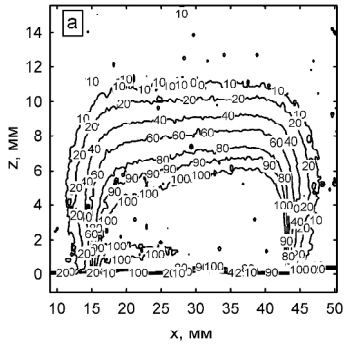


Рис. 1. 2-х мерное распределение относительной плотности, измеренное для пучка с энергией 2.5 МэВ,(z-глубина)

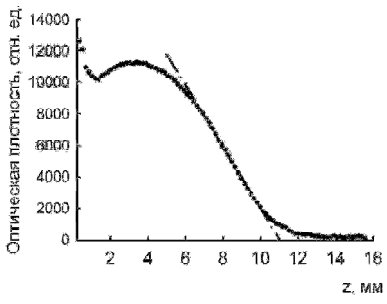


Рис. 2. Глубинное распределение относительной дозы в тканеэквивалентной среде для электронного пучка с энергией 2.5 МэВ (x=0)

На рисунке 2 представлено глубинное распределение измеренной оптической плотности, в распределении наблюдается резкий скачок оптической плотности на глубине 0.1–0.7 мм, который, объясняется поглощением электронов низких энергий, рассеянных на бериллиевой фольге выходного окна и других элементов конструкций выходного патрубка бетатрона. Координата z соответствует направлению вдоль распространения пучка (глубина). На глубине 1.3 мм начинается рост оптической плотности, который сменяется областью терапевтического плато. На больших глубинах следует линейный спад, характерный для электронного излучения, который сменяется экспоненциальным спадом, характерным для сопутствующего гамма-излучения. Величина наиболее вероятной кинетической энергии электронного пучка для практического диапазона равна 2.4 МэВ, что хорошо согласуется с оценкой, полученной из временных характеристик ускорения пучка в бетатроне.

На рисунке 3 представлены кривые глубинного распределения относительной поглощённой дозы, измеренные ионизационной камерой в водном фантоме на бетатроне с энергией 6 МэВ для ряда конусов, поглощенная доза R_{50}=2.5 см. Во время эксперимента измерены величины относительной поглощенной дозы от электронного пучка энергией 6 МэВ на разной глубине для ряда конусов. По данным результатам построены дозовые профили пучков т.е зависимости поглощенной дозы от расстояния до оси пучка на определенной глубине водного фантома, профили пучка однородны и симметричны.

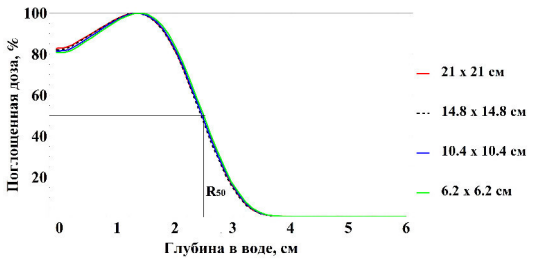


Рис. 3. Кривые глубинного распределения относительной поглощённой дозы, на линейном ускорителе Elekta Synergy с энергией 6 МэВ для ряда конусов

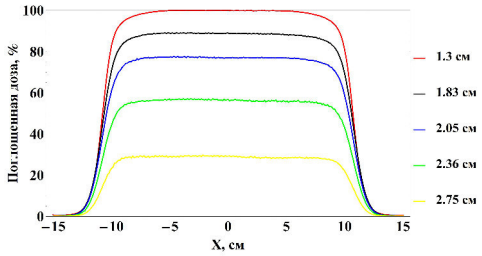


Рис. 4. Кривые распределения относительной поглощённой дозы, измеренные на линейном ускорителе Elekta Synergy с энергией 6 МэВ на различной глубине для конуса: 21×21 см

Из рисунка 4 видно, что с увеличением глубины количество поглощенной дозы уменьшается, на глубине 1.3 см поглощенная доза равна 100 %, а уже на глубине 2.75 см доза составляет 20 %. т.е 80 % дозы приходится на первые 2.5 см.

Заключение. Таким образом, проведенные исследования показали соответствие полученных глубинных и поперечных распределений электронного пучка обоих ускорителей международным стандартам: по плоскостности и симметричности пучка (профиль), глубине (все параметры соответствуют выбранной энергии). Данный прототип бетатрона может служить для изготовления бетатронов для клинического использования, в частности для ИОЛТ

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Труды 103 МКРЗ / Под ред. М.Ф. Киселёва и Н.К.Шандалы.. – М.: ООО ПКФ «Алана», 2009. – 67 с.
2. Куликова Е.С., Вагнер А.Р. Методика диагностики пучков рентгеновского и гамма излучения, измерения распределения дозы в водном фантоме с помощью полимерной плёнки GAFCHROMIC EBT film // Сборник трудов V Международной научно-практической конференции «Физико – Технические проблемы атомной энергетики и промышленности». – г. Томск, 2010 г. – с. 71.

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. *The theoretical study of elastically deformed state and analysis of deformation mechanisms in nanocrystals in the zones of localization of elastic distortions and related disclinational type defects - dipole, quadrupole and multipole of partial disclinations are conducted.*

Введение. Представления о ротационных модах деформации, частичных дисклинациях, их диполях и мультиполях как носителях пластической деформации и переориентации кристаллической решетки в металлических сплавах развиваются с середины 70-х годов прошлого века [1]. При анализе микромеханизмов этих мод деформации, как правило, используются кооперативные дислокационные модели образования и эволюции дефектов дисклинационного типа [2]. В работах [3, 4] показана возможность формирования нанодиполей частичных дисклинаций в зонах локализации упругих дисторсий. Образование этих дефектов не связано с коллективными дислокационными явлениями. В настоящей работе проведено теоретическое исследование упруго – напряженного состояния и энергий дефектов дисклинационного типа в указанных выше зонах.

Материалы и методы исследования. Вычислительный эксперимент и визуализация полей напряжений и пространственного распределения упругой энергии проведены в программной среде Maple 15. Моделирование полей напряжений проведено с использованием явного вида компонент тензора напряжений [5]. Анализ зависимости энергии дисклинационных конфигураций (диполь / квадруполь) проведен с использованием численного интегрирования по методу Гаусса в адаптивной 30-точечной вариации, при оценках значений интегрирования применялось правило Кронрода по 61 точке.

Результаты. В процессе электронно – микроскопического исследования особенностей пластической деформации в субмикрокристаллическом никеле обнаружено явление локализации деформации в области упругих дисторсий с образование полос переориентации с высокой (сотни град/мкм) упругой кривизной кристаллической решетки и нанодиполи частичных дисклинаций на фронте распространения этих полос [3, 4].

Теоретический анализ полей напряжений в окрестности нанодиполя клиновых дисклинаций с экспериментально обнаруженными значениями $l \approx 6$ нм (плечо нанодиполя) и $\varphi \approx 1°$ (угол переориентации) показал, что величины диагональных компонент тензора напряжений и градиентов этих напряжений достигают очень высоких значений при величинах $P = (\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz})/3 \approx \approx \pm E/50$ и $\partial P/\partial x \sim$ (10–20) Е мкм$^{-1}$ (E – модуль Юнга). Важной особенностью поля напряжений нанодиполя является также то, что максимальные значения сдвиговых компонент тензора напряжений τ_{xy}, под действием которых осуществляются сдвиги, локализованы перед фронтом движущегося диполя. На наш взгляд, это обстоятельство является значительным силовым фактором образования квадрупольных конфигураций на фронте распространения нанополос переориентации (рис. 1 в). Это приводит к более сложным мультипольным конфигурациям – ансамблям взаимодействующих между собой квадруполей.

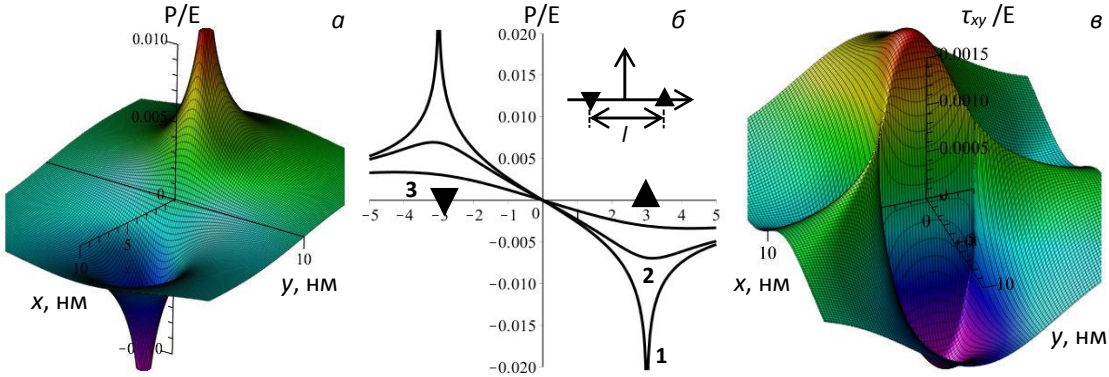


Рис. 1. а – пространственное распределение давления $P = (\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33})/3$ *нанодиполя частичных клиновых дисклинаций с размером плеча l = 6 нм и значением вектора Франка ω ≈ 1°; б – значения P на разных расстояниях (y) от плоскости залегания диполя (y = 0 – кривая 1, y = 1 нм – кривая 2, y = 3 нм – кривая 3); в – компоненты* τ_{xy} *тензора напряжений.*

Исходя из экспериментальных данных, для анализа полей напряжений в качестве исследуемой системы был выбран мультиполь с расстоянием между квадруполем и диполем $m_1 = 6$ нм и длиной квадруполя $m_2 = 12$ нм. Показано, что мультипольная конфигурация является сложной экранированной системой с преимущественной локализацией полей напряжений в области залегания дисклинаций с максимальными значениями $P \approx E/50$, близкими к таковым для нанодиполя.

Проведен сравнительный анализ распределения удельной упругой энергии дисклинационных конфигураций, формирующихся в процессе продвижения нанодиполя частичных дисклинаций (рис. 2). Из этих расчетов следует, что имеются значительные различия в энергиях как квадрупольных, так и мультипольных конфигураций по сравнению с нанодиполем частичных дисклинаций в широком интервале размеров (длин) квадруполей. При этом энергия мультипольных конфигураций оказывается в несколько раз меньше энергии нанодиполя (рис. 2 в).

Исходя из проведенного анализа особенностей упруго – напряженного состояния и энергий рассмотренных дисклинационных конфигураций, предложен механизм формирования нанополос локализованной упругой дисторсии.

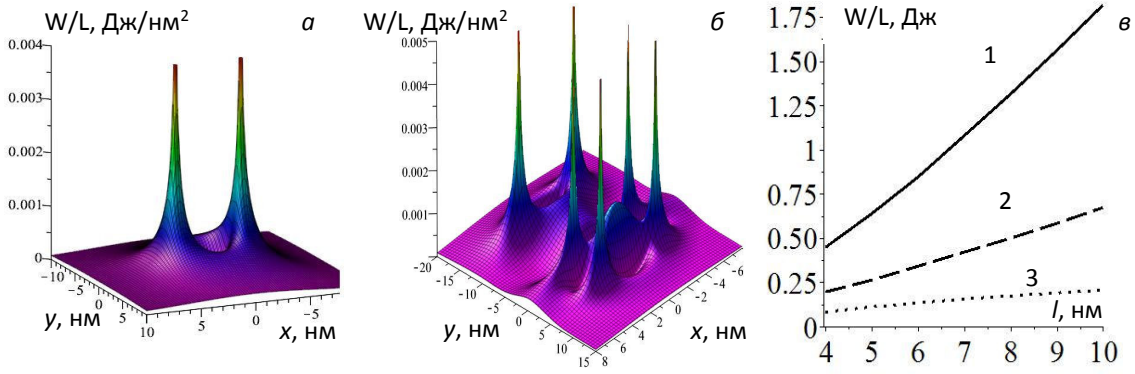


Рис. 2. Пространственное распределение удельной упругой энергии нанодиполя частичных дисклинаций с параметрами l = 6 нм, $\omega \approx 1°$ (а) и мультиполя частичных дисклинаций с параметрами $l = m_1$ = 6 нм, m_2 = 12 нм $\omega \approx 1°$ (б); погонная энергия нанодиполя – кривая 1, квадруполя с фиксированным плечом m = 6 нм – кривая 2 и мультиполя с фиксированными плечами m_1 = 6 нм, m_2 = 12 нм – кривая 3 (в).

Заключение. Показано, что характерной особенностью указанных выше дисклинационных конфигураций являются высокие значения диагональных компонент тензора напряжений и их градиентов $P \approx E/50$ и $\partial P/\partial x \approx 0{,}02\ E$ нм$^{-1}$. Специфической особенностью пространственного распределения сдвиговой компоненты тензора напряжений τ_{xy} является локализация ее максимальных значений перед фронтом движения нанодиполя. Обнаружено значительное (кратное) уменьшение энергий квадрупольных и мультипольных конфигураций по сравнению с нанодипольными в широком интервале их геометрических размеров.

Предложен механизм локализации деформации в области упругих дисторсий, представляющий собой квазипериодическую последовательность формирования и релаксации дисклинационных ансамблей различного типа с периодическим изменением энергии дефекта.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Вергазов А. Н. Характерные элементы дислокационной структуры в деформированном поликристаллическом молибдене / А. Н. Вергазов, В. А. Лихачев, В. В. Рыбин // Физика металлов и металловедение. – 1976. – Т. 42, № 1. – С. 146-154.
2. Владимиров В. И. Физическая природа разрушения металлов / В. И. Владимиров // – М.: Металлургия, 1984. – 280 с.
3. Тюменцев А.Н. Нанодиполи частичных дисклинаций как носители квазивязкой моды деформации и формирования нанокристаллических структур при интенсивной пластической деформации металлов и сплавов / А.Н. Тюменцев, И.А. Дитенберг // Физическая мезомеханика. – 2011. – Т. 14, № 3. – С. 55–68.
4. Тюменцев А.Н. Структурные состояния с высокой кривизной кристаллической решетки в субмикрокристаллических и нанокристаллических металлических материалах / А.Н. Тюменцев, И.А. Дитенберг // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2011. – Т. 54, № 9. – С. 26–36.
5. Владимиров В. И. Дисклинации в кристаллах / В.И. Владимиров, А.Е. Романов //– Л.: наука, 1986. – 223 с.

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ПОТЕРИ В НАВОДОРОЖЕННОМ ТИТАНЕ ВТ1-0 ПРИ РАСПРОСТРАНЕНИИ В НЕМ ВИХРЕВЫХ ТОКОВ

Сюй Шупэн

Научный руководитель: профессор В.В. Ларионов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: 1208502516@qq.com

DIELECTRIC LOSSES IN HYDROGENATED VT1-0 TITANIUM IN DISTRIBUTION IN EDDY CURRENT

Xu Shupeng

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

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

E-mail: 1208502516@qq.com

Abstract. *For the first time introduced the concept of the value of the dielectric loss in the hydrogenated titanium. Measurement of this value allowing more sensitive measurement of the distribution of hydrogen in the titanium sample according to the depth. This concept is widely used in the analysis of the plasma properties of semiconductors and other materials.*

Введение. Целью данной работы является исследование применения величины диэлектрических потерь для целей диагностики состояния водорода в титане. По определению тангенс угла диэлектрических потерь равен tgδ = j_a/j_r , где j_a – плотность активного тока, j_r - плотность реактивного тока. В слабых электрических полях, которые реализуются в магнитном спектрометре ЗМА, плотность тока можно вычислить, используя закон Ома в дифференциальной форме, $j_a = \sigma E$, где σ – проводимость титанового образца, E – напряженность электрического поля. Образец из титана представляет собой плоскую пластину площадью S и длиной d (модель конденсатора емкостью С), в котором распространяется вихревой ток. Поэтому

$$j_r = I_r / S = \omega C U / S = \omega \varepsilon_0 \varepsilon E \qquad (1)$$

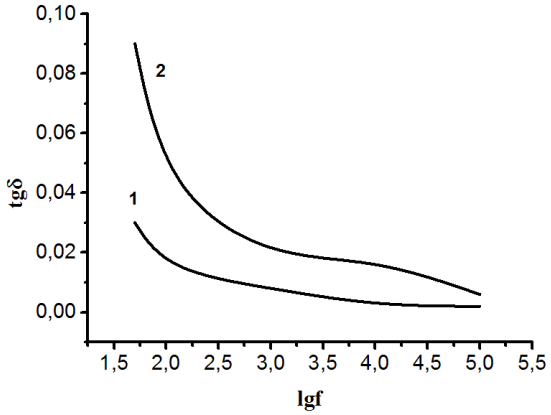
где ε_0 – электрическая постоянная, ω – циклическая частота вихревого тока, ε – диэлектрическая проницаемость материала. Тогда тангенс угла диэлектрических потерь равен

$$j_r = j_a / j_r = \sigma / \omega \varepsilon_0 \varepsilon \qquad (2)$$

Материалы и методы. Наводороживание осуществлялось по методу Сивертса [1,2]. После насыщения были проведены измерения концентрации водорода при помощи анализатора водорода RHEN602 фирмы LECO. Послойное измерение содержания водорода проведено на магнитном спектральном анализаторе (МСА) с применением методов чувствительности, предложенными авторами в работе [3-4]. Измерение сопротивления образцов титана на постоянном токе проводили с использованием программно-измерительного комплекса «KEIHLEY INSTRUMENTS».

Результаты и обсуждение. Диэлектрические потери в исследуемом материале связаны с особенностями структуры титанового сплава в наводороженном состоянии. В веществах с плотной упаковкой атомов в присутствии примесей (рис. 1), дефектов, дислокаций, искажающих решетку,

диэлектрические потери возрастают. Обычно потери связывают с явлением поляризации и изменением электропроводности. Здесь могут быть заметны потери от электропроводности. На это указывает измерения электропроводности в работе [3]. При этом как показывает экспериментальные данные, примеси даже в малом количестве резко увеличивают диэлектрические потери. Так в диапазоне частот от 10 до 10^4 герц тангенс угла диэлектрических потерь изменяется на три порядка. Для исследованных концентраций водорода в титане характерны две ветви для зависимости tgδ, возрастающая и ниспадающая. Потери, возрастающие с увеличением частоты, и потери заметно возрастающие с увеличением температуры, когда tgδ уменьшается с увеличением частоты. Такая зависимость в литературных источниках приписывается дипольному характеру структуры материала. Потери первого вида объясняются релаксационной поляризацией. Они, например, сильно выражены в веществах с ионной структурой (рис. 1). Чистые вещества обладают небольшими релаксационными потерями. Введение примесей приводит к возрастанию диэлектрических потерь вследствие нарушения структуры титанового сплава [6].



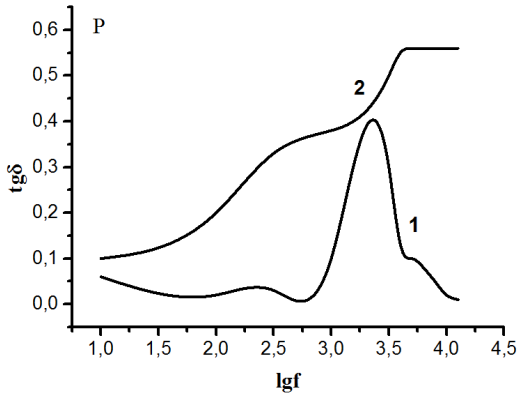
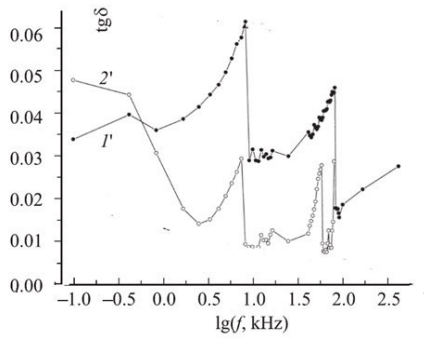


Рис. 1. Пример зависимости tg δ от частоты для NaCl (1- без примесей, 2 – с примесями)

Рис. 2. Пример зависимости тангенса угла диэлектрических потерь от частоты для веществ с дипольным строением

Причины большого различия в диэлектрических потерях объясняются тем, что электронная поляризация **в** диэлектриках устанавливается за различные времена**.**



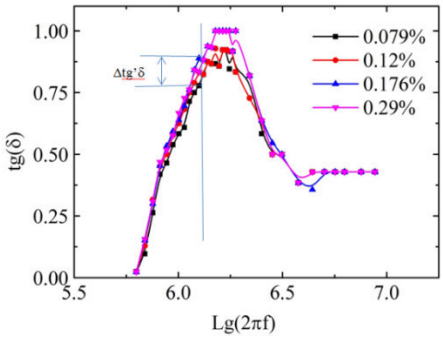


Рис.3 (слева). Зависимость тангенса угла диэлектрических потерь для пленки Ta_xO_y на подложке GaAs без обработки (1') и после обработки в плазме кислорода (2') [7].

Рис.4. Зависимость тангенса угла диэлектрических потерь для наводороженного титана

Коэффициент потерь меняется с изменением частоты, содержания примесей (рис.1), температуры и влажности. Содержание добавок в композиционных материалах сопровождается бóльшими значениями tg δ (рис.2). Частотная зависимость потерь является характеристикой материала и определяется для каждого материала не только свойствами молекул материала, но и наличием и составом примесей. Как правило, потери имеют максимум при одной или нескольких частотах, в зависимости от типа молекул (см. рис. 3, 4). Положение максимумов характеризуется собственными частотами установления поляризации. Они могут быть связаны с поворотом полярных молекул в жидком диэлектрике или с поворотом домена в сегнетоэлектрике. Исследование частотного поведения потерь (**диэлектрическая спектроскопия)** позволяет изучать структуру веществ.

Как следует из рисунка 3 наблюдается несколько ветвей зависимости tg δ от частоты вихревого тока. На рис. 4 величина изменения тангенса на одной и той же частоте позволяет определять концентрацию одорода в титане на различных глубинах образца.

Выводы. Заключение. Основной вклад в потери вносят процессы проводимости и установления поляризации. Проводимость определяет потери под действием постоянного напряжения и, в меньшей степени, при низких частотах. По мере повышения частоты возрастает роль поляризационных потерь. Поляризация устанавливается не мгновенно, а в течение некоторого времени, зависящего от типа поляризации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. 1. Larionov, V.V., Lider, A.M., Krasnov, D.N. (2014). Measurement Techniques Measurements of the Laminar Concentration of Hydrogen in Titanium Using Eddy Currents of Different Frequency. Measurement Techniques 57, no 5, pp. 564–568.
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. Larionov, V.V., Lider, A.M., Sednev, D.A., Xu, S. Compulsory Checking of Nuclear Power Engineering Materials by Direct and Eddy Current. (2016). IOP Conference Series: Materials Science and Engineering 142 (1), 012032.
4. Чжу И., Сюй Ш., Ларионов В.В. Исследование диффузии водорода в титане ВТ1-0 вихревыми токами // В сборнике: Перспективы развития фундаментальных наук. Сборник научных трудов XIII Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых: в 7 томах. –2016. – С. 313–315.
5. Ларионов В.В., Лидер А.М. Влияние водорода на проводимость титана в условиях облучения электронами // Известия высших учебных заведений. – Физика. – 2014. – Т. 57. № 11-2. – С. 124–128.
6. Лидер А.М., Ларионов В.В., Гаранин Г.В. Ультразвуковой метод определения водородного охрупчивания титановых сплавов // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. – 2014. – Т. 80.– № 10. – С. 43–46.
7. Калыгина В.М., Зарубин А.Н., Новиков В.А., Петрова Ю.С., Скакунов М.С., Толбанов О.П., Тяжев А.В., Яскевич Т.М. Влияние кислородной плазмы на свойства пленок оксида тантала // ФТП. – 2010. – Т. 44. – вып.9. – С. 1266–1273.

ГАЗОФАЗНОЕ ГИДРИРОВАНИЕ ЦИРКОНИЕВОГО СПЛАВА Э110 ДО РАЗЛИЧНЫХ КОНЦЕНТРАЦИЙ ВОДОРОДА С РАВНОМЕРНЫМ РАСПЕРДЕЛЕНИЕМ

Сюэ Юйхан

Научный руководитель: ассистент кафедры общей физики В.Н. Кудияров

Томский политехнический университет,

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

E-mail: 1102465474@qq.com

THE GAS-PHASE HYDROGENATION OF ZIRCONIUM ALLOY E110 TO DIFFERENT CONCENTRATION WITH A UNIFORM DISTRIBUTION

Xue Yuhang

Scientific supervisor: assistant of General Physics department V.N. Kudiiarov

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

E-mail: 1102465474@qq.com

Abstract. *Undertake a study the gas-phase hydrogenation of zirconium alloy E110 to different concentrations of hydrogen with a uniform distribution. Shows the experimental data and made basic findings which show that at a constant temperature of 500 °C and an initial pressure of 2.24 atm grinding surface of the alloy increases the hydrogen sorption rate 1.45 times, and the surface oxidation of the alloy leads to a decrease in speed hydrogen sorption 1.83 times.*

Циркониевые сплавы применяются в активной зоне водо-водяных энергетических реакторов, использование циркония для этой цели обусловлено основной физической характеристикой конструкционного материала активных зон – малым коэффициентом захвата нейтронов, также у сплавов циркония высокая коррозионная стойкость и поэтому они не требуют сложного легирования [1,2]. При эксплуатации циркониевых сплавов в активной зоне происходит проникновение и накопление водорода в них, потому что у них хорошая склонность к поглощению водорода. Проникновение и накопление водорода в циркониевых сплавах приводит к образованию гидридов и охрупчиванию, что может вызвать их разрушение по механизму замедленного гидридного растрескивания, как следствие, приводит к ухудшению эксплуатационных свойств изделий. В этом случае, мы не можем продлить ресурс тепловыделяющих сборок легководяных реакторов без решения проблемы наводороживания и коррозии циркония, и их состав. Одним методом повышения свойств циркониевых сплавах и их защиты от наводороживания и коррозии является изменение состояния поверхности материалов [3]. Таким образом, актуальной проблемой является исследование влияние состояния поверхности на сорбцию водорода циркониевым сплавом.

Материалы и методика исследований. Объектом исследований являлись прямоугольные плоские образцы циркониевого сплава Э110 размерами 5×10×0,1 мм. Образцы были разделены на три категории: исходные, шлифованные и окисленные. Образцы подверглись шлифованию наждачными бумаги с маркировками по ISO-6344 600, 1500 и 2000 для удаления окисной пленки и подготовки поверхности для дальнейшего эксперимента. Окисление осуществлялось с помощью процесса электролитического

насыщения, образцы перед окислением обрабатывают чистым и сухим водородом, чтобы получить поверхность, лишенную всякой окисной пленки, затем охлаждают до температуры окисления и только потом водород заменяется очищенным воздухом [4]. Образцы используются для исследования процессов сорбции и десорбции водорода при помощи автоматизированного комплекса Gas Reaction Controller LP, который разработан, чтобы определить количество адсорбированного газа при различных температурах и давлениях в диапазоне твердое. Для того чтобы дать количественную оценку сплаву, необходимо определить концентрацию элементов в материале. Концентрацией называют отношение количества данного вещества или его массы к объёму сплава, то есть это отношение неоднородных величин. Содержание водорода по массе рассчитывалось по формуле (1):

$$w = \frac{m_1}{m} * 100\% \quad (1)$$

где ω (%) – концентрация водорода по массе, масс. %; m_1 – масса образца до насыщения, г; m – масса образца после насыщения, г.

Наводороживания производилось из газовой среды при заданных параметрах: 500 °C, p0 =2 атм., p =1 атм. После проведения насыщения образцов из газовой среды с помощью полученных экспериментальных данных можно вычислить скорости сорбции водорода по формуле (2):

$$q = \frac{V}{t * F} \times \ln(\frac{P}{P_0}) \quad (2)$$

Для расчета необходимо знать: объем камеры V($см^3$), время наводороживания t(c), удельную площадь поверхности F($см^2$), начальное и конечное давление водорода p(атм.) и p_0(атм.). Из полученных значений сравнивается влияние различных состояний на скорости сорбции водорода [5].

Результаты исследований. Состояние поверхности циркониевого сплава Э110 и соответственные концентрации по массе (H2) представлены в таблице 1.

Таблица 1. Состояние поверхности Э110 и соответственные концентрации по массе (H_2)

№	Состояние поверхности	Масса образца до насыщения, г	Масса образца после насыщения, г	Концентрация по массе, масс. %
1	Исходное	0,1135	0,1154	1,64
2	Шлифованное	0,1103	0,1123	1,78
3	Окисленное	0,1152	0,1167	1,29

На рисунке 1 представлены кривые зависимости давления водорода в реакционной камере от времени наводороживания циркониевого сплава Э110 с различными состояниями поверхности при постоянной температуре 500 °C.

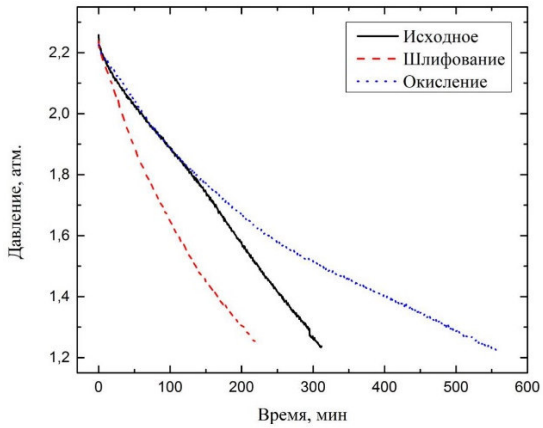


Рис. 1. Кривая зависимости давления водорода от времени наводороживания циркониевого сплава Э110 с различными состояниями поверхности

Установлено, что модифицирование поверхности существенным образом изменяет скорость сорбции водорода в отличии от исходного циркониевого сплава. Результат расчета скорости сорбции водорода представлены в таблице 2.

Таблица 2. Результат расчёта скорости сорбции водорода

Тип	Состояние поверхности	Температура, °С	Скорости сорбции водорода, $\times 10^{-5}$м/с
1	Исходное	500	1,125
2	Шлифованное	500	1,614
3	Окисленное	500	0,634

При постоянной температуре 500 °С скорость сорбции шлифованного образца выше, чем у образца в состоянии поставки и окисленного в 1,43 и 2,55 раза соответственно.

Заключение. В настоящей работе проведено исследование сорбции водорода сплавом Э110 с различным состоянием поверхности. На основе полученных результатов можно сделать следующий вывод: при постоянной температуре 500 °С и начальном давлении 2,24 атм, шлифование поверхности сплава приводит к увеличению скорости сорбции водорода в 1,45 раз, а окисление поверхности сплава приводит к снижению скорости сорбции водорода в 1,83 раза.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Чернов И.П., Березнеева Е.В., Пушилина Н.С., Кудияров В.Н., Коваль Н.Н., Крысина О.В., Шугуров В.В., Иванова С.В., Николаева А.Н. Свойства ZrO2 и TiO2 покрытий, полученных методом плазменно-ассистированного дугового напыления на циркониевом сплаве Э110 // Журнал технической физики, 2015, том 85, вып. 2 – С. 102-104.
2. Петельгузов И.А. Исследование кинетики коррозии твэльных труб из кальциетермического циркониевого сплава Zr+1%Nb (Zr1Nb) в воде при температуре 350°С и в паре при температурах 400 и 500°С // ВОПРОСЫ АТОМНОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ. 2002. №6 – С. 90-94.
3. Калина Б.А. Учебник для вузов. / Под общей ред. – М.: МИФИ, 2008 – С. 176-180.
4. Шмаков А.А., Смирнов Е.А. Абсорбция водорода оболочками твэлов легководных реакторов. – Научная Сессия Мифи - 99. – С. 125-134.
5. Zuttel A. Materials for hydrogen storage, Materials Today. 2003. vol. 6, №9, P. 24-33.

ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА МОНО- И ПОЛИКРИСТАЛЛОВ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СПЛАВА $NI_{50,3}TI_{32,2}HF_{17,5}$

А.И. Тагильцев, Н.Г. Ларченкова

Научный руководитель: д.ф.-м.н., доцент, Е.Ю. Панченко, д.ф.-м.н., профессор, Ю.И. Чумляков

Национальный исследовательский Томский государственный университет,

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

E-mail: antontgl@gmail.com

FUNCTIONAL PROPERTIES IN SINGLE- AND POLYCRYSTALS OF HIGH-TEMPERATURE $NI_{50,3}TI_{32,2}HF_{17,5}$ ALLOY

A.I. Tagiltsev, N.G. Larchenkova

Scientific Supervisor: Dr. Sci., docent, E.Y. Panchenko, Dr. Sci., professor, Y.I. Chumlyakov

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

E-mail: antontgl@gmail.com

Abstract. *Thermoelastic martensitic transformations were investigated in single crystals and polycrystals of high-temperature $Ni_{50,3}Ti_{32,2}Hf_{17,5}$ alloy. It was shown, that functional properties, such as strain, thermal hysteresis, characteristic temperatures, superelasticity are different in single crystals and polycrystals. The inner microstructure provides either low characteristic temperature, decreasing hysteresis, difficult generation and easy growth of martensite in single crystals or high characteristic temperatures, increasing hysteresis, easy generation and difficult growth of martensite in polycrystals. Besides, it was suggested, that large coefficient α, that characterizes the growth of stress with the increase of temperature M_s, in combination with wide thermal hysteresis result in the absence of superelasticity in polycrystals.*

Введение. Создание и исследование высокопрочных структурно-неоднородных материалов, способных испытывать термоупругие мартенситные превращения и вследствие этого обладать эффектом памяти формы и сверхэластичностью, является одной из наиболее перспективных и актуальных задач современного материаловедения. Данная работа посвящена исследованию моно- и поликристаллов сплава никелида титана, легированного Hf. Яркой особенностью сплава NiTiHf является то, что при увеличении легируемого элемента свыше 10-15% можно наблюдать реализацию термоупругого мартенситного превращения при высоких температурах [1]. Таким образом, способность сплавов NiTiHf испытывать МП при высоких как внешних приложенных напряжениях (свыше 1 ГПа), так и температурах (до 800 К) позволит применять сплавы в авиакосмической промышленности [2]. Однако в настоящее время данные сплавы исследованы слабо для их полноценного использования в каких-либо сферах деятельности. Именно поэтому целью текущей работы является изучение и сравнение функциональных свойств (величины эффекта памяти формы и сверхэластичности, температурного интервала развития СЭ) в моно- и поликристаллах сплава $Ni_{50,3}Ti_{32,2}Hf_{17,5}$ при реализации *B*2-*B*19’ мартенситного превращения при деформации сжатием.

Материалы и методы исследования. Для исследования были выбраны моно- и поликристаллы сплава $Ni_{50,3}Ti_{32,2}Hf_{17,5}$ (ат.%). Поликристаллы данного сплава выплавлены в индукционной печи с использованием «чистых» компонентов (концентрация элемента составляет не менее 99,9%).

Монокристаллы с использованием данных поликристаллических заготовок были выращены методом Бриджмена в атмосфере инертного газа. Образцы вырезаны на электроискровом станке «АРТА-153» в форме параллелепипеда со сторонами 3x3x6 мм^3. Для исследования монокристаллов была выбрана [111] ориентация, которая определялась на рентгеновском дифрактометре «Дрон-3» с использованием Fe$K\alpha$ излучения. Перед проведением механических испытаний образцы механически шлифовались, а затем электрохимически полировались. Механические испытания моно- и поликристаллов проведены на дилатометре ИМРС-1. Моно- и поликристаллы исследовали в исходном состоянии: на них не проводилось никаких дополнительных термических обработок после получения материала.

Результаты. В моно- и поликристаллах сплава $Ni_{50,3}Ti_{32,2}Hf_{17,5}$ был исследован эффект памяти формы в циклах охлаждения/нагрева под действием внешних постоянных сжимающих нагрузок (рис. 1).

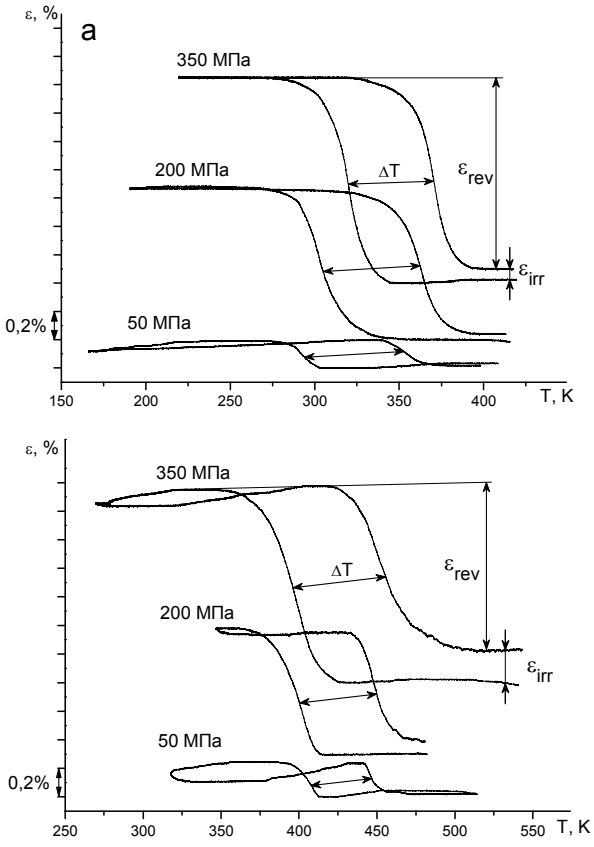


Рис. 1. Кривые e(T) при приложенных 50, 200 и 350 МПа в: (а) [111]-монокристаллах и (б) поликристаллах сплава $Ni_{50,3}Ti_{32,2}Hf_{17,5}$

ЭПФ как в моно-, так и в поликристаллах реализуется при приложении 50 МПа и выше, низкая величина напряжений (<50 МПа) не обеспечивает рост ориентированного варианта мартенсита и, соответственно, изменения размеров образца. Величина наблюдаемой обратимой деформации как в поликристаллах, так и в монокристаллах возрастает вплоть до 1,1% и 1,5%, соответственно, при увеличении приложенной постоянной нагрузки в ходе эксперимента вплоть до 350 МПа. Необратимая деформация в обоих состояниях появляется выше 100 МПа и вплоть до 350 МПа не превышает 0,3%. По полученным кривым $\varepsilon(T)$ была построена зависимость $\sigma(T)$, описывающая изменение температуры для начала прямого МП (M_s) при заданной внешней нагрузке (рис. 2). Наблюдается линейная зависимость напряжений от температуры испытаний, что в общем случае описывается уравнением Клапейрона-Клаузиуса [3]. Эта зависимость может быть охарактеризована коэффициентом α, который отвечает за рост напряжений с увеличением температуры и обратно пропорционален деформации превращения. Кроме этого видно (рис. 2), что СЭ в поликристаллах не обнаружена. Предположительной причиной отсутствия СЭ как раз и является большой коэффициент α [4]. Помимо всего прочего, МП в поликристаллах и монокристаллах сплава $Ni_{50,3}Ti_{32,2}Hf_{17,5}$ различаются характеристическими температурами: МП в монокристаллах начинается при более низких температурах (на 100К), нежели в поликристаллах.

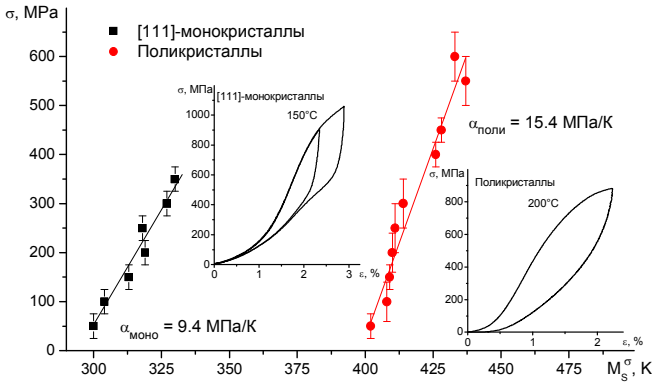


Рис. 2. Зависимость $\sigma(M_s^\sigma)$ для [111]-монокристаллов и поликристаллов сплава $Ni_{50,3}Ti_{32,2}Hf_{17,5}$

Причиной этого могут быть несколько факторов: во-первых, как известно, в богатых никелем сплавах никелида титана (Ni > 50 ат.%) небольшое увеличение концентрации Ni приводит к значительному уменьшению характеристических температур [3]. Методом энергодисперсионного анализа было выяснено, что в монокристаллах присутствует больше Ni, чем в поликристаллах (~ на 1,0-1,5%). Остальные компоненты сплава находятся в пределах погрешности 0,5% от номинального состава. Увеличение концентрации Ni в монокристаллах может быть связано с образованием карбидов титана TiC и оксидов Ti_4Ni_2O во время роста монокристаллов. Во-вторых, отсутствие в монокристаллах границ зерен, которые служат преимущественным местом зарождения мартенсита. Одной из немаловажных особенностей МП является температурный гистерезис ΔT, который характеризует рассеяние энергии при развитии обратимых МП. Обнаружена различная зависимость температурного гистерезиса от внешних сжимающих напряжений: ΔT уменьшается в монокристаллах и увеличивается в поликристаллах с увеличением приложенных напряжений. Такое изменение ΔT в монокристаллах связано с увеличением температуры начала прямого МП (M_s), тогда как увеличение температурного гистерезиса ΔT в поликристаллах зависит от повышения температуры обратного МП (A_f). В поликристаллах границы зерен выступают как места преимущественного зарождения мартенсита, которое затрудняет переориентацию и движение межфазной границы, что в итоге приводит к увеличению гистерезиса ΔT с ростом напряжений σ и деформации превращения ε.

Заключение. Таким образом, подтверждено, что поли- и монокристаллы сплава $Ni_{50,3}Ti_{32,2}Hf_{17,5}$ в исходном состоянии способны испытывать термоупругие мартенситные превращения с максимальной величиной эффекта памяти формы до 1.1% (поликристаллы) и 1.5% (монокристаллы). Сочетание высокого коэффициента α и рост температурного гистерезиса может быть причиной отсутствия СЭ в исходных поликристаллах $Ni_{50,3}Ti_{32,2}Hf_{17,5}$.

Благодарность. Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 14-29-00012

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Saghaian S.M. [et. al.] Effects of aging on the shape memory behavior of Ni-rich Ni50.3Ti29.7Hf20 single crystals // Acta Materialia. – 2015. – V. 87. – P. 128–141.
2. Karaca H.E., Saghaian S.M. et al Compressive response of nickel-rich NiTiHf high-temperature shape memory single crystals along the [1 1 1] orientation // Scripta Materialia. – 2011. – №65. – P. 577–580.
3. Сплавы с эффектом памяти формы / Под ред. Х. Фунакубо – М.: Металлургия, 1990. – 224 с.
4. Chumlyakov Yu. I., Kireeva I.V., Panchenko E.Yu., et. al. High-temperature superelasticity in CoNiGa, CoNiAl, NiFeGa, and TiNi monocrystals // Russian Physics Journal. – 2008. – V.51. – №10. – P. 1016-1036.

АНАЛИЗ МЕХАНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ГРАДИЕНТНЫХ СКАФФОЛДОВ, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ ПЛАВКИ

М.С. Ткачев, Е.А. Чудинова, Е.С. Мельников

Научный руководитель: снс, к.ф-м.н. М.А. Сурменева

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: 5.877@mail.ru

ANALYSIS OF MECHANICAL PROPERTIES OF GRADIENT SCAFFOLDS OBTAINED BY ELECTRON-BEAM MELTING

M.S. Tkachev, E.A. Chudinova, E.S. Melnikov

Scientific Supervisor: senior researcher, M.A. Surmeneva

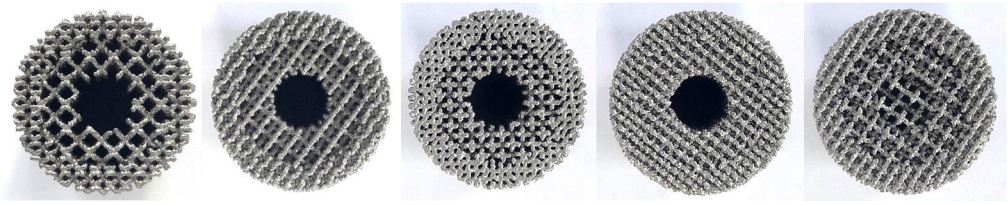
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: 5.877@mail.ru

Abstract. *Ti-based mesh structures with different size and shape of lattice were fabricated via electron beam melting. Mechanical properties of the obtained samples were investigated using uniaxial compression testing scanning electron microscopy allowed to estimate compression test mechanism. The homogeneity and the presence of powder in inner structure were investigated by scanning electron microscopy.*

Введение. На сегодняшний день титан и его сплавы нашли широкое применение в имплантологии, благодаря высокой химической стойкости, прочности и биосовместимости [1]. Актуальной проблемой имплантологии является лечение крупных сегментных дефектов костей, которая может быть решена благодаря использованию титановых скэффолдов [1]. Так как пористость кости неоднородна по объёму, а изменяется в зависимости от расстояния от центра [1], то наиболее подходящим решением, в случае сегментной замены, являются градиентные сетчатые структуры. Данные структуры позволяют регулировать процессы васкуляризации и остеоинтеграции за счет изменений размеров ячеек градиентного скэффолда. Кроме того, за счет изменения параметров ячейки имеется возможность контролировать механические свойства [1]. Важными механическими параметрами для имплантата являются модуль упругости и предел прочности. Высокие значения модуля упругости имплантата являются причиной эффекта «экранирования напряжений»[2]. В связи с этим, целью данной работы являлось исследование механических свойств градиентных скэффолдов с различными размерами ячеек сетчатой структуры.

Материалы и методы исследования. В данной работе исследованы пять типов цилиндрических сетчатых структур (рис.1) на основе сплава титана ВТ6 высотой 30 мм, полученные методом электронно-лучевой плавки (ЭЛП) на установке фирмы «ARCAM» (Mid Sweden University). Геометрические параметры исследуемых скэффолдов представлены в таблице 1. Изображения профилей представлены на рис. 1. Измерения механических характеристик осуществлялись с использованием двухколонной испытательной системы «Instron 3369 (Illinois Tool Works Inc., USA)». Исследования морфологии выполнены на сканирующем электронном микроскопе (СЭМ).



R1 R2 R3 R4 R5

Рис. 1. Изображения профилей, полученных скэффолдов

Таблица 1

Геометрические параметры полученных скэффолдов согласно их CAD моделям.

Тип образца	Внутренняя структура (диаметр 5 мм)	Средняя структура (диаметр 11 мм)	Внешняя структура (диаметр 15 мм)
R1	Отсутствует	Восьмиугольная 2.0 мм	Восьмиугольная 1.25 мм
R2	Отсутствует	Алмазоподобная 2.0 мм	Алмазоподобная 1.25 мм
R3	Отсутствует	Восьмиугольная 1.25 мм	Восьмиугольная 1.0 мм
R4	Отсутствует	Алмазоподобная 1.25 мм	Алмазоподобная 1.0 мм
R5	Алмазоподобная 3.0 мм	Алмазоподобная 2.0 мм	Алмазоподобная 1.25 мм

Результаты. На рис. 2. представлена морфология поверхностей скэффолдов после механических испытаний. Изображения образцов после механических испытаний позволяют оценить морфологию недеформированных участков и проанализировать механизм деформации скэффолда. Образцы имеют развитую поверхность, что предпочтительно для клеточной адгезии [3].

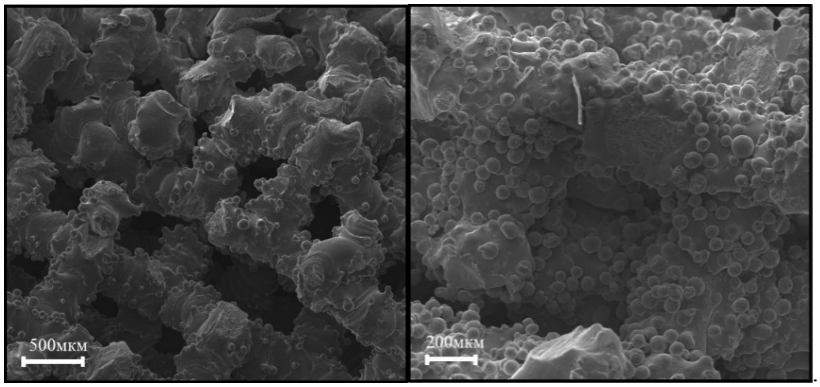


Рис. 2. СЭМ-изображение скола образца R2 и R4 после механических испытаний

Кривая напряжение-деформация, полученная в результате механических испытаний представлена на рис. 3. В результате испытаний на одноосное сжатие образцов определены предел прочности, модуль упругости и предел текучести материалов (таблица 2). Модуль упругости полученных образцов принимает значения в диапазоне от 0,9 до 3,6 ГПа, в то время как предел прочности изменяется от 31 до 212 МПа. Полученные значения модулей упругости образцов схожи и не превышают значений, характерных для костной ткани, для кортикальной кости от 3 – 30 ГПа, для губчатой кости от 0,02 – 2 ГПа [1, 4]. Предел прочности образцов соответствует значениям из диапазона для костной ткани от 10 до 200 МПа [1, 4].

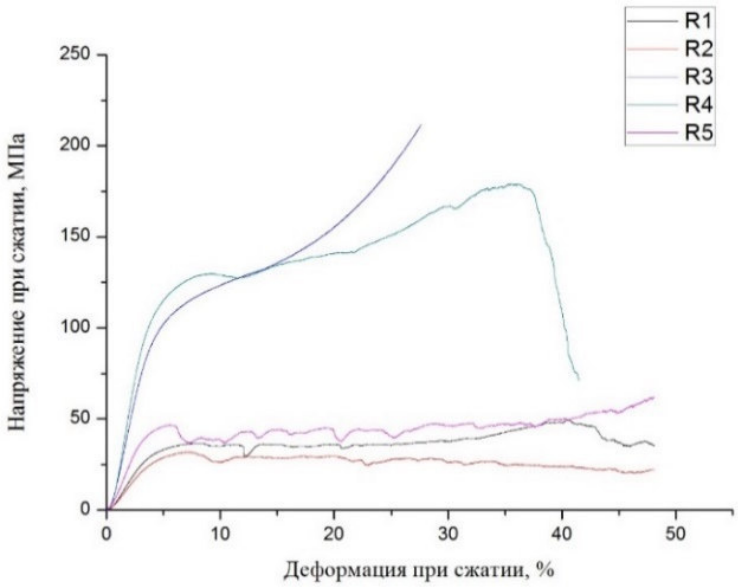


Рис. 3. Кривая напряжение-деформация механических испытаний на сжатие полученных образцов всех типов

Таблица 2

Результаты механических испытаний на сжатие полученных скэффолдов

Тип образца	Предел прочности [МПа]	Модуль упругости [ГПа]	Предел текучести [ГПа]
R1	48±1	1,25±0,47	36,59
R2	31±1	0,87±0,08	31,82
R3	212±1	2,26±0,07	-
R4	162±24	3,09±0,55	129,78
R5	49±19	1,28±0,35	46,77

Деформация образцов на сжатие имеет аналогичный механизм что и пластичный материал (рис. 2) [4]. Деформация образцов происходит преимущественно за счет изгиба и смыкания сетчатой структуры (рис.2).

Выводы. Методом ЭЛП были получены скэффолды на основе титанового сплава ВТ6 с градиентной структурой. Поверхность скэффолдов является однородной и обладает развитой морфологией, образцы имеют механические параметры схожие с человеческой костью. В процессе разрушения образцы деформировались аналогично пластичным металлам. Таким образом, данные скэффолды являются перспективными в проведении дальнейших испытаний и использования в медицинской практике.

Авторы благодарят А. Коптюга за помощь в работе. Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ 15-13-00043.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wang X. et al. Topological design and additive manufacturing of porous metals for bone scaffolds and orthopaedic implants: a review //Biomaterials. – 2016. – Т. 83. – pp. 127-141.
2. Parthasarathy J. et al. Mechanical evaluation of porous titanium (Ti6Al4V) structures with electron beam melting (EBM) // Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials. – 2010. – Vol. 3, No. 3. – P. 249–259
3. Алехин А.П. и др. Синтез биосовместимых поверхностей методами нанотехнологии // Рос. Нанотехнол. – 2010. – Т. 9, № 10. – С. 128–136.
4. Kienapfel H. et al. Implant fixation by bone ingrowth // Journal of Arthroplasty. – 1999. – Vol. 14, No. 3. – pp. 355–368

СНИЖЕНИЕ ПОТЕРЬ В ИМПУЛЬСНОМ ТРАНСФОРМАТОРЕ СИСТЕМЫ ИНЖЕКЦИИ БЕТАТРОНА

А.П. Шестак, Н.Ж. Тойбаев

Научный руководитель: А.П. Шестак

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск

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

E-mail: toibayevnurlan@gmail.com

LOSS REDUCING IN PULSE TRANFORMER OF BETATRON INJECTION SYSTEM

A. P. Shestak, N.J. Toibayev

Scientific Supervisor: A.P. Shestak

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

E-mail: toibayevnurlan@gmail.com

Abstract. *Present betatrons have limited operating frequency, which is no more than 400 Hz. It's caused by thermal operating mode of betatron elements. High voltage injection system is the one of betatron elements. The highest thermal losses is observed in core of impulse transformer. Too high thermal losses in pulse transformer core causes distortion of high voltage injection pulse shape and break the electron capture condition. That's why the betatron dose rate is decreased.*

Введение. Современные бетатроны имеют предельную рабочую частоту не более 400 Гц. Это связанно с тепловыми режимами работы различных элементов бетатрона. К таким элементам относится система высоковольтной инжекции. Наибольшие тепловые потери системы инжекции наблюдаются в сердечнике импульсного трансформатора. Чрезмерно большие потери в сердечнике импульсного трансформатора приводят к искажению формы импульса напряжения инжекции и нарушают условия захвата электронов, из-за чего снижается доза тормозного излучения.

Механизмы образования потерь. В магнитопроводе выделяют два вида магнитных потерь: потери от гистерезиса и потери от вихревых токов. Существует еще один механизм образования потерь в ленточных магнитопроводах импульсного трансформатора, влияние которого становится ощутимо при достаточно больших значениях скорости изменения магнитного потока. При намотке сердечника происходят локальные замыкания по краям смежных слоев ленты, и возникает проводимость между соседними слоями. В результате этого образуются контуры тока, что приводит к дополнительным потерям.

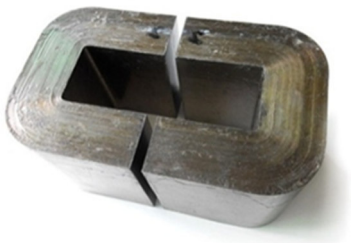


Рис. 1. Разрезной ленточный магнитопровод.

Способы снижения потерь. В данной работе рассмотрен последний механизм образования потерь и предложен способ его подавления. Была рассмотрена и подтверждена возможность проведения электроэрозионной обработки одной из боковых сторон ленточного магнитопровода.

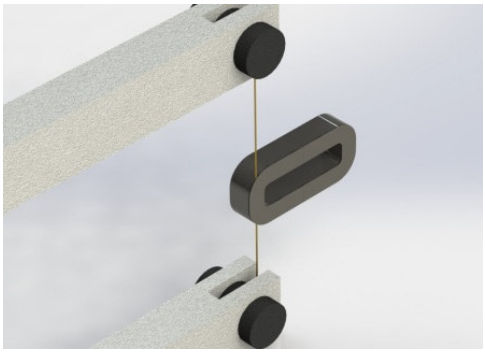


Рис. 2. Электроэрозионная обработка.

Электроэрозионная обработка не оказывает механического воздействия на кристаллическую структуру магнитного материала, а высокая скорость протяжки проволоки удаляет тонкие слои компаунда в зоне раза.

Экспериментальная часть. Для оценки эффективности предложенного способа снижения магнитных потерь были измерены ток холостого хода небольшой партии ленточных магнитопроводов до и после электроэрозионной обработки.

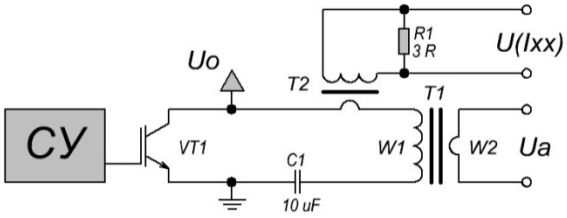


Рис. 3. Схема измерения тока холостого хода

Импульсный трансформатор T1 представляет собой каркас с обмотками W1 и W2, в который устанавливались тестируемые ленточные сердечники. T2 – трансформатор тока для измерения тока в цепи первичной обмотки. Обмотка W2 состоит из одного витка и позволяет определять значение U_a.

Рис. 4. Ленточные магнитопроводы (слева до обработки, справа после обработки).

Результаты. Согласно результатам проведённых измерений, снижение тока холостого хода и, следовательно, магнитных потерь в тестируемых сердечниках в среднем составило более 14%. Приведённая оценка не учитывает три сердечника с номерами 6, 15 и 25, так как данные образцы показали снижение тока холостого хода, значительно превышающее среднее значение, рис. 5. Таким образом, можно увидеть возможный уровень вклада потерь на боковое замыкание в суммарные потери в магнитопроводе. Однако несколько сердечников показали обратный эффект – у образцов с номерами 3, 9, 17 и 19 наблюдается незначительное повышение тока холостого хода. Объяснить подобный результат можно предположив, что у данных образцов потери на боковое замыкание слоев были изначально низкие. А повышение тока холостого хода произошло в результате уменьшения сечения магнитопроводов при обработке.

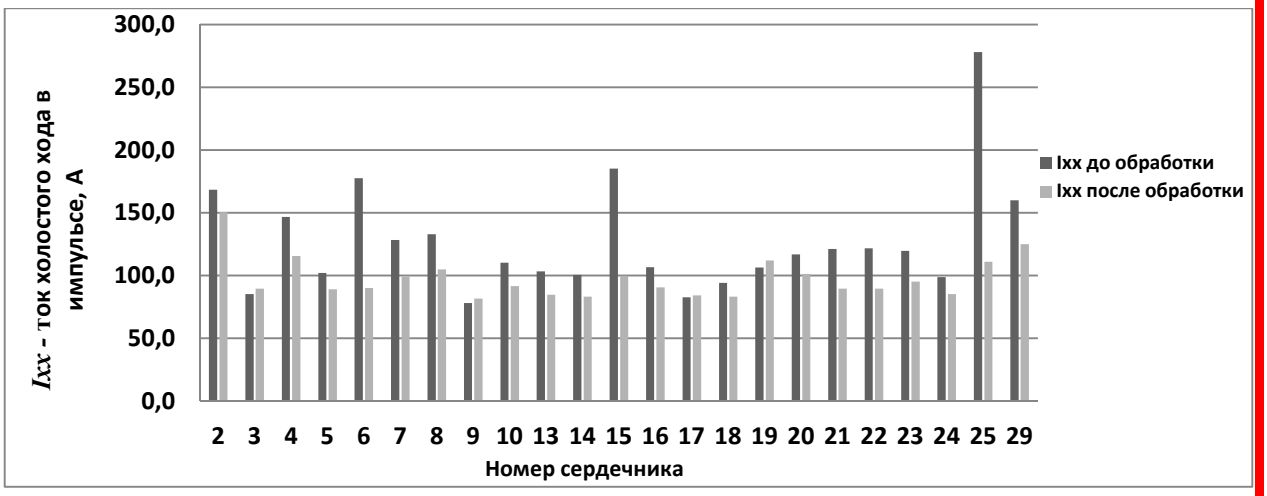


Рис. 5. Гистограмма измерений тока холостого хода

Заключение. Предложенный нами способ снижения магнитных потерь в импульсном трансформаторе системы инжекции может быть использован при разработке высокочастотного бетатрона для систем промышленной томографии и досмотровых систем грузового транспорта. Кроме того, электроэрозионная обработка дает возможность работать с лентой из аморфных сплавов с толщиной менее 0.05 мм без существенной деформации кристаллической структуры ферромагнитного материала.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Москалёв В.А., Сергеев Г.И. // Индукционный ускоритель электронов – бетатрон: учебное пособие – Томск: Изд-во Томского политехнического университета – 2012. –312 с.
2. Прецизионные сплавы: Справочник / Под ред. Б.В. Молотилова. М.: Металлургия, 1983.
3. И.В. Лавринович, Н.В. Жарова и др. Малогабаритный источник импульсного рентгеновского излучения для высокоскоростной радиографии // ПТЭ. 2013, № 3, с.90 – 96.
4. http://www.youtube.com/watch?v=XquokGq5654 – Электроэрозионная резка трансформаторной стали.
5. A. A. Filimonov, S.V. Kasyanov, V.A. Kasyanov. Special aspects in designing high-frequency betatron. Journal of Physics: Conference Series 671 (2016) 012023. DOI:10.1088/1742-6596/671/1/012023

ТЕРМОУПРУГИЕ МАРТЕНСИТНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ ПОД НАГРУЗКОЙ В [011]-МОНОКРИСТАЛЛАХ СПЛАВА $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$ ПОД ДЕЙСТВИЕМ РАСТЯГИВАЮЩИХ И СЖИМАЮЩИХ НАПРЯЖЕНИЙ

А.Б. Тохметова, Н.Г. Ларченкова, Е.Е. Тимофеева

Научный руководитель: доцент, . 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: aida-tx@mail.ru

STRESS-INDUCED THERMOELATIC MARTENSITIC TRANSFORMATIONS IN [011] – ORIENTED $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$ SINGLE CRYSTALS IN TENSION AND COMPRESSION

A.B. Tokhmetova, N.G. Larchenkova, E.E. Timofeeva

Scientific Supervisor: Dr. Sci., docent, E.Y. Panchenko, Dr.Sci., prof., Y.I. Chumlyakov

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

E-mail: aida-tx@mail.ru

Abstract. *The effect of the stress state (tension/compression) on the thermoelastic $L2_1$ -(14M)$L1_0$ martensitic transformations in heating/cooling cycles under the constant stress and in loading/unloading cycles at fixed temperature in [011]-oriented $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$ single crystals was determined. The martensitic transformation at cooling/heating occurs with a maximum reversible strain of 4.1 % at constant tensile stress of 50 MPa, and the value of the thermal hysteresis decreases with the increase of applied stresses. On the contrary, the value of thermal hysteresis in isobaric tests and stress hysteresis in isothermal tests increase with the growth of the external stress level or given strain. An bursting character of the reverse martensitic transformation in compression is observed. The reversible strain reaches 5.5 % in cooling/heating cycles at the compressive stress of 60 MPa. Such asymmetry of the properties in [011]-oriented $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$ single crystals at the stress-induced martensitic transformations is caused both by the detwinning processes of $L1_0$-martensite crystals in compression, and by the difficulty of the detwinning processes in tension.*

Введение. Сплавы на основе NiFeGa(Co) – одни из самых перспективных ферромагнитных материалов с термоупругим мартенситным превращением (МП), в которых наблюдаются эффект памяти формы (ЭПФ) и сверхэластичность (СЭ). На данных сплавах была обнаружена однократная магнитоиндуцированная деформация 8,5 – 10 % [1]. В отличие от широко известных сплавов Ni_2MnGa, данные сплавы имеют запас пластичности и могут найти широкое применение в современных технологиях [2]. В работе [3] выявлена сильная ориентационная зависимость и обнаружена асимметрия функциональных свойств при развитии МП под нагрузкой в [001]-монокристаллах при деформации растяжением и сжатием. Теоретический расчёт деформации превращения с учётом образования сдвойникованного варианта мартенсита ε_{CVP} и его последующего раздвойникования ε_{detw} показывает, что под действием сжимающей нагрузки в [011]-монокристаллах NiFeGa(Co) $\varepsilon_{CVP} = 3{,}1$ %, $\varepsilon_{detw} = 3{,}0$ %, следовательно, $\varepsilon_{tr} = \varepsilon_{CVP} + \varepsilon_{detw} = 6{,}1$ %. Тогда как под действием растягивающей нагрузки вдоль [011]-направления $\varepsilon_{tr} = \varepsilon_{CVP} = 4{,}1$ %, т.е. $\varepsilon_{detw} = 0$ также как под действием сжимающей нагрузки в [001]-

монокристаллах [4]. Раздвойникование кристаллов мартенсита под нагрузкой может давать значительный вклад в величину механического и термического гистерезисов. Поэтому целью данной работы является изучение асимметрии развития термоупругих МП в [011]-монокристаллах $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$ под действием растягивающей и сжимающей нагрузки.

Методика эксперимента. Монокристаллы $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$ (ат. %) выращивали методом Бриджмена. Ориентацию образцов определяли на рентгеновском дифрактометре «Дрон-3». Образцы для деформации сжатием имели форму параллелепипеда с размерами рабочей части (3×3×6) мм^3, для деформации растяжением – форму двойных лопаток с размерами (16×1,3×2,7) мм^3. Исследования проводились на монокристаллах в исходном состоянии. Перед испытанием образцы шлифовали и электролитически полировали. Изотермические циклы «нагрузка-разгрузка» при комнатной температуре T = 297 К проводились на установке Instron 3369, общая заданная деформация в цикле составляла 2 ÷ 6 % при скорости деформации 6 % в минуту. Механические испытания для наблюдения ЭПФ проводили на установке ИМРС-1, погрешность измерения которой составляет 0,3 %.

Обсуждение результатов. На рис. 1а представлены кривые ε(T) при охлаждении/нагреве на монокристаллах $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$, ориентированных вдоль [011]-направления под действием постоянных сжимающих напряжений. При охлаждении/нагреве в свободном состоянии в [011]-монокристаллах образуется самоаккомодирующая структура и изменение размеров образца не происходит. Под действием внешних напряжений 20 МПа наблюдается ЭПФ с величиной обратимой деформации 3,5 % и узким термическим гистерезисом 40 К. С ростом приложенных напряжений до 60 МПа реализуется максимальная обратимая деформация 5,5 % которая близка к теоретически рассчитанной величине $\varepsilon_{tr} = \varepsilon_{CVP} + \varepsilon_{detw} = 6{,}1$ % с учётом раздвойникования кристаллов мартенсита, а гистерезис ΔT увеличивается до 80 К. При внешних напряжениях 60 МПа обратное МП имеет взрывной характер, т.е. деформация образца происходит в очень узком интервале температур $\Delta_1 = \Delta_2 \to 0$ К ($\Delta_1 = M_s - M_f$, $\Delta_2 = A_f - A_s$), практически мгновенно. ДЭПФ при деформации сжатием, наблюдается после термоциклировании через интервал МП под действием сжимающей нагрузки 60 МПа, величина обратимой деформации которого составляет 1,3 % (рис. 1а). В монокристаллах деформированных под действием растягивающей нагрузки (рис. 1б) при охлаждении/нагреве в свободном состоянии сразу же наблюдаем ДЭПФ с малой величиной обратимой деформации 0,4 % в пределах погрешности измерений. При внешних приложенных напряжениях 20 МПа обратимая деформация меньше на 1,4 %, а гистерезис шире на 9 К, чем в монокристаллах деформированных под действием сжимающей нагрузки. Однако, после увеличения напряжений от 20 МПа до 50 МПа термический гистерезис уменьшается на 8 К. Обратимая деформация растёт с увеличением приложенных напряжений и достигает 4,1 %, которая совпадает с теоретически рассчитанной величиной $\varepsilon_{tr} = \varepsilon_{CVP}$ ($\varepsilon_{detw} = 0$) = 4,1 %. При

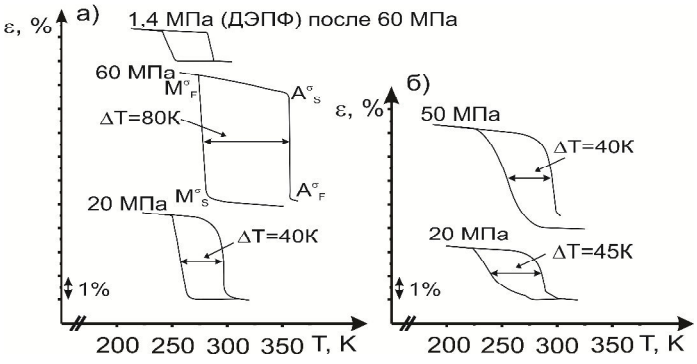


Рис. 1. ЭПФ в [011]-монокристаллах $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$ а) под действием сжимающей нагрузки б) под действием растягивающей нагрузки

50 МПа температурные интервалы прямого и обратного МП широкие Δ_1=58 К, Δ_2=22 К, в отличие от кристаллов, деформированных под действием сжимающей нагрузки $\Delta_1 = \Delta_2 \rightarrow 0$ К. Термоциклирование при $\sigma \leq 50$ МПа не приводит к дополнительному росту внутренних напряжений, необходимых для наведения ДЭПФ. Величина обратимой деформации ДЭПФ остаётся в пределах погрешности.

На рис. 2 представлены кривые зависимости σ(ε), при T = 295 К на монокристаллах $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$, ориентированных вдоль [011]-направления. Кривые σ(ε) при деформации сжатием демонстрируют нестабильное течение – наблюдается две стадии уменьшения и увеличения напряжения с ростом деформации. Первая стадия заканчивается при деформации $\varepsilon = \varepsilon_{CVP} = 3$ %, при которой образуется сдвойникованный вариант мартенсита $\varepsilon_{detw} = 3{,}1$ % и начинается вторая стадия. При достижении заданной деформации 6 %, что соответствует полному раздвойникованию кристаллов мартенсита $\varepsilon_{tr} = \varepsilon_{CVP} + \varepsilon_{detw}$ наблюдается полная стабилизация $L1_0$-мартенсита, а обратное МП происходит только путём дополнительного нагрева на 20-30 К. При этом МП носит взрывной характер. Механический гистерезис Δσ, характеризующий рассеяние энергии при развитии обратимых МП, увеличивается в 2 раза с ростом заданной деформации от 2 до 5 %. Под действием растягивающей нагрузки в циклах нагрузка/разгрузка, когда напряжения превышают 50 МПа [011]-монокристаллы разрушаются, и т.о. наблюдать кривую СЭ невозможно.

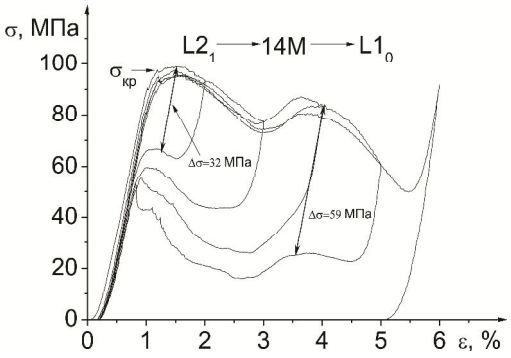


Рис. 2. Кривые зависимости напряжения от деформации при T = 297 К для [011]-монокристаллов $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$ под действием сжимающей нагрузки

Выводы. Показано, что раздвойникование кристаллов $L1_0$-мартенсита под нагрузкой в условиях изотермических и изобарических испытаний в [011]-монокристаллах $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$ под действием сжимающей нагрузки приводит к стабилизации $L1_0$-маретнсита, резкому росту термического и механического гистерезиса с ростом величины ЭПФ и СЭ и взрывному характеру МП.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 16-19-10250.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Morito H., Fujita A., Oikawa K., Ishida K., Fukamichi K., Kainuma R. Stress-assisted magneticfield-induced strain in Ni–Fe–Ga–Co ferromagnetic shape memory alloys // Applied physics letters. 2007. V. 90. P. 201–203.
2. Pons J., Cesari E., Segu C., Masdeu F. Ferromagnetic shape memory alloys: Alternatives to Ni–Mn–Ga // Mater. Science and Eng. A,. – 2008. – V. 481-482. – P. 57-65.
3. Панченко Е.Ю., Чумляков Ю.И., Тимофеева Е.Е., Казанцева Л.П., Maier H.J. Ориентационная зависимость высокотемпературной сверхэластичности в ферромагнитных монокристаллах Ni-Fe-Ga // «Деформация и разрушение материалов», 2010. – № 2. – С. 22 – 29.
4. Тимофеева Е. Е. Закономерности термоупругих мартенситных превращений, эффекта памяти формы и сверхэластичности в монокристаллах ферромагнитных сплавов Ni-Fe-Ga-(Co): автореферат диссертации на соискание ученой степени канд. физ.-мат. наук. – Томск, 2012. – 19 с.

ОСОБЕННОСТИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ МЕХАНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК МЕТОДОМ НАНОИНДЕНТИРОВАНИЯ МАТЕРИАЛОВ, ПОЛУЧЕННЫХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Д.А. Турлыкожаева

Научный руководитель: старший научный сотрудник Центра технологий ФТИ М.А. Сурменева

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: dana.1993.21.07@mail.ru

FEATURES OF THE DETERMINATION OF MECHANICAL CHARACTERISTICS BY THE NANOINDENTION METHOD OF MATERIALS FABRICATED BY ADDITIVE MANUFACTURING FOR MEDICAL APPLICATION

D.A. Turlykozhayeva

Scientific Supervisor: Senior Researcher of the Center for FTI Technologies M.A. Surmeneva

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

E-mail: dana.1993.21.07@mail.ru

Abstract. *The rough samples of titanium were fabricated by electron beam melting (EBM). The calcium phosphate films were deposited via radio friquency magnetron sputtering onto EBM-fabricated titanium substrates. The hardness and elastic modulus of calcium phosphate-coated substrate of VT6 were measured by nanoindentation test. To evaluate the values of the hardness and the Young's modulus of calcium phosphate coating and rough substrate the ten measurements were performed for each load in the range of 10 μN - 10 mN.*

Введение. В настоящее время особое значение придается прочности и долговечности материалов для создания медицинских имплантатов. В процессе жизнедеятельности человека имплантаты подвергаются значительным механическим нагрузкам. Получение имплантатов с помощью аддитивных технологий является перспективным, однако поверхность полученных сплавов обладает высокими значениями шероховатости. Для улучшения биологической совместимости имплантата поверхность используемых материалов модифицируют. В связи с этим, актуальным вопросом является корректное измерение механических характеристик на наноуровне. Одним из распространенных способов исследования механических свойств на наноуровне является метод наноиндентирования. Однако результаты измерений зачастую не соответствуют истинным характеристикам тонкой пленки, так как учитывается вклад влияния механических характеристик подложки. Кроме этого существенные отклонения измерениям придает и шероховатость поверхности [1].

В данном исследовании для определения модуля Юнга и нанотвердости титана марки ВТ6 с кальций-фосфатным покрытием используется методика Оливера и Фарра, которая заключается в непрерывном измерении величины приложенной силы P и глубины отпечатка − h, построении характерных P(h) диаграмм и учете реальной геометрии используемого индентора. Метод Оливера и Фарра является распространенным и наиболее точным для определения твердости и упругости тонких плёнок, но измерения данным методом несколько затрудняются, это связанно с тем, что отклик индентора при его проникновении внутрь образца определяет механические свойства плёнки и подложки

одновременно. Для увеличения статистики измерения твердости образца в данном исследовании используется дополнительно метод Виккерса. Метод Виккерса основан на вдавливании алмазного наконечника в форме правильной четырехгранной пирамиды, с углом при вершине между противоположными гранями 136° и измерении диагонали полученного отпечатка, оставшегося на исследуемой поверхности после снятия заданной нагрузки [2]. Целью данной работы является измерение механических характеристик тонких плёнок на основе кальций-фосфата на подложке ВТ6, полученной аддитивными технологиями, методом Оливера и Фарра, и методом Виккерса.

Экспериментальная часть. В данной работе исследованы образцы на основе сплава титана ВТ6, полученные методом электронно-лучевой плавки (ЭЛП) на установке фирмы «ARCAM» (Mid Sweden University). Для измерения нанотвердости и модуля Юнга образцов использовался прибор Нанотрибоиндентометр TI-950 Triboindenter (Hysitron, USA). Исследуемые образцы имеют высокую шероховатость (Ra=24 мкм), с учетом этого измерения проводились в отдельных выбранных локально ровных точках поверхности в диапазоне глубин отпечатка от 15 нм до единиц мкм и диапазоне нагрузок от 10 мкН до 10 мН. При индентировании был использован индентор Берковича. Для измерения микротвердости образца ВТ6 без покрытия использовался стационарный твердомер HV-1000. Для уменьшения шероховатости проводилась шлифовка образца. Микротвердость определялась при значениях скорости нагружения алмазной пирамидки и скорости обратного хода равных 60 мН/мин, время выдержки под нагрузкой 15 с, с нагрузкой 200 и 300 гр. Расчеты велись на основании результатов 10 измерений и нахождении среднего значения [3].

Результаты. На рисунках 1, 3, 4 представлены экспериментальные данные измерений нанотвердости и модуля Юнга. В полученных данных на рисунках с 1, 3, 4 большим разбросом проявляются высокая шероховатость поверхности и сильная неоднородность структуры. Это говорит о наличии существенных неоднородностей поверхности материала покрытия. Данный факт подтверждает изображение, полученное на оптическом микроскопе, представленное на рисунке 2. Так как толщина покрытия составляет 780 нм, то на глубине 1500 – 2000 нм значения характерны для титанового сплава, полученного методом электронно-лучевого плавления.

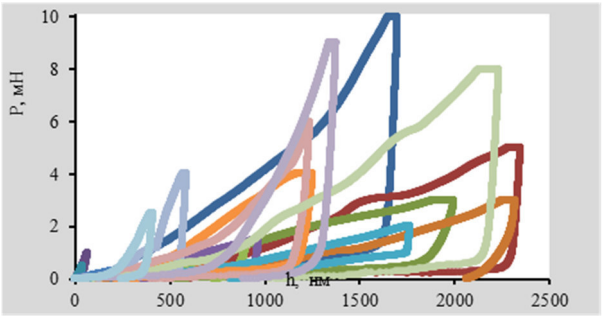


Рис. 1. P(h) диаграммы, полученные при индентировании образца ВТ6 с кальций-фосфатным покрытием

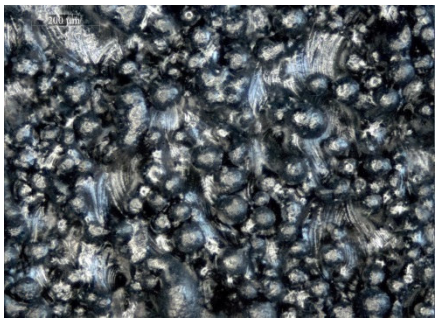


Рис. 2. Оптический снимок поверхности образца титана ВТ6 после осаждения покрытия на основе кальций-фосфата

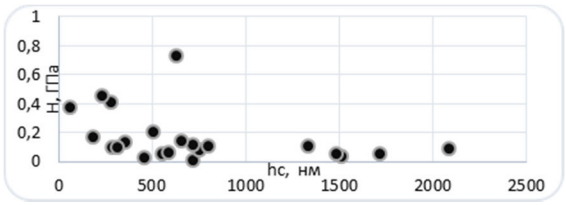


Рис. 3. Зависимость нанотвердости – H от глубины отпечатка – hc при индентировании образца ВТ6 с кальций-фосфатным покрытием

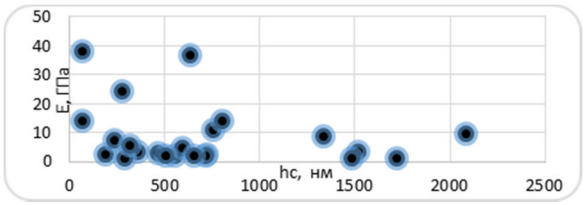


Рис. 4. Зависимость модуля Юнга – E от глубины отпечатка – hc при индентировании образца ВТ6 с кальций-фосфатным покрытием

Таким образом, твердость и модуль Юнга для образца на глубине 1500 – 2000 нм имеют значения 0,1 – 0,2 ГПа и 5 – 13 ГПа. Низкие значения полученных данных могут быть объяснимы разными причинами: (1) Измерение системы покрытие подложка приводит к деформации сплава, создавая под индентором композит на основе материала покрытия и подложки. (2) Возможно, структура материала содержит в себе поры и дефекты, приводящие к низким значениям модуля Юнга и твердости. Данные значения являются характерными для значений, оцененных в условиях одноосного сжатия пористого титана, полученного аддитивными технологиями.

Для измерении микротвердости образца ВТ6 с кальций-фосфатным покрытием, была получена минимальная шероховатость поверхности образца равная 0,206 мкм. Полученная шероховатость является приемлемой для обнаружения отпечатка индентора. При нагрузке 200 гр среднее значение микротвердости по Викерсу (HV) составило 323,83. При нагрузке 300 гр среднее значение микротвердости составило 366,85. Данные значения твердости по Виккерсу для сплава титана марки ВТ6 свидетельствует о высокой твердости сплава [4].

Вывод. Данные результаты исследования позволили определить ряд физико-механических свойств (твердость и модуль Юнга) образцов на основе сплава титан и кальций-фосфатного покрытия в зависимости от глубины отпечатка. Несмотря на проведение исследований в локально выбранных ровных участках материал покрытия имеет существенный разброс локальных физико-механических свойств. Полученные значения микротвердости и модуля Юнга для образцов, полученных аддитивными техгнологиями, согласно литературным данным являются характерными для сплавов титана марки ВТ6.

Авторы благодарят к.ф.-м.н. А. Коптюга и Е. Мельникова за получение образцов для исследования. Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ 15-13-00043.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Epple M., Surmenev R.A. Bioactive surfaces for hard tissue regeneration // RSC Adv. – 2013. – Т. 3. – № 28. – С. 11057.
2. Surmenev R.A., Surmeneva M.A., Tyurin A.I., Pirozhkova T.S., Shuvarin I.A. Nanoindentation of a hard ceramic coating formed on a soft substrate // Tech. Phys. – 2016. – Т. 86. – № 9. – С. 89–95.
3. Staiger M.P., Pietak A.M., Huadmai J., Dias G. Magnesium and its alloys as orthopedic biomaterials // Biomaterials. – 2006. – Т. 27. – № 9. – С. 1728–1734.
4. Surmenev R.A., Surmeneva M.A., Ivanova A.A. Significance of calcium phosphate coatings for the enhancement of new bone osteogenesis // Acta Biomater. – 2014. – Т. 3. – № 10. – С. 557–579.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРИМЕНИМОСТИ ТВЕРДОТЕЛЬНОГО ФАНТОМА SP34 ДЛЯ ОРТОВОЛЬТНОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

О.В. Тхорик, 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: oxana.tkhorik@gmail.com

INVESTIGNATION OF APPLICABILITY OF SOLID STATE PHANTOM SP34 FOR ORTHOVOLTAGE X-RAY

O.V. Tkhorik, E.S. Sukhikh

Scientific Supervisor: assistant professor, PhD, E.S. Sukhikh

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

E-mail: oxana.tkhorik@gmail.com

Abstract. *It is now widely used two types of tissue-equivalent phantoms: Solid and water. Water is the "gold standard" in accordance with the recommendations of the IAEA as a medium for measurements of absorbed dose for both photon and electron beams for, as the water has the most similar to human tissue characteristics. However, from a practical standpoint, water phantom is not always convenient to use, because it requires much time for preparation work. The output in such a situation would be to use a solid-state phantom with coefficients that take into account the difference between the electronic and physical material density against distilled water.*

Введение. В настоящее время широко используются два вида тканеэквивалентных фантомов: твердотельный и водный. Вода является «золотым стандартом» согласно рекомендациям МАГАТЭ в качестве среды для измерений поглощенной дозы, как для фотонных, так и для электронных пучков, поскольку вода обладает максимально схожими с человеческими тканями характеристиками [1]. Однако с практической точки зрения водный фантом не всегда является удобным в применении, поскольку требует большого времени подготовки к работе. Выходом в такой ситуации может стать использование твердотельного фантома вместе с коэффициентами, которые учитывают разницу между электронной и физической плотностью материала относительно дистиллированной воды.

Целью данной работы является экспериментальное подтверждение возможности использования твердотельного тканеэквивалентного фантома для ортовольтного рентгеновского излучения. Поскольку по данным производителя подобный материал фантом может использоваться для абсолютной и относительной дозиметрии в диапазоне энергий фотонного излучения от 1,25 МэВ до 50 МэВ и электронного излучения от 4 МэВ до 50 МэВ.

Материалы и методы исследования. Для подтверждения данной гипотезы были проведены ряд экспериментов и компьютерного моделирования по глубинному распределению дозы внутри фантомов. Измерения поглощенной дозы проводилось как в водном фантоме, так и в твердотельном фантоме при одинаковом расстоянии источник – поверхность для всех возможных размеров полей. Ионизационная камера облучалась при напряжении трубки: 100, 120, 150, 180, 200, 250, 300 кВ.

В первую очередь были произведены измерения глубинные измерения дозы в водном и твердотельном фантомах на гамма-терапевтическом аппарате TheratronEquinox 100. Гамма-терапевтический аппарат TheratronEquinox 100 - это внешняя система, предназначенная для проведения лучевой терапии. Theratron предназначен для доставки назначенной дозы радиации на определенный участок тела и заданным способом (фиксированное лечение или лечение с перемещающимся пучком, с использованием устройств модификации пуска или без них и т.д.). В качестве источника выступает ^{60}Co. Использование ^{60}Co в эксперименте обусловлено тем, что применение фантома SP34 в данном диапазоне энергий не вызывает сомнений [2].

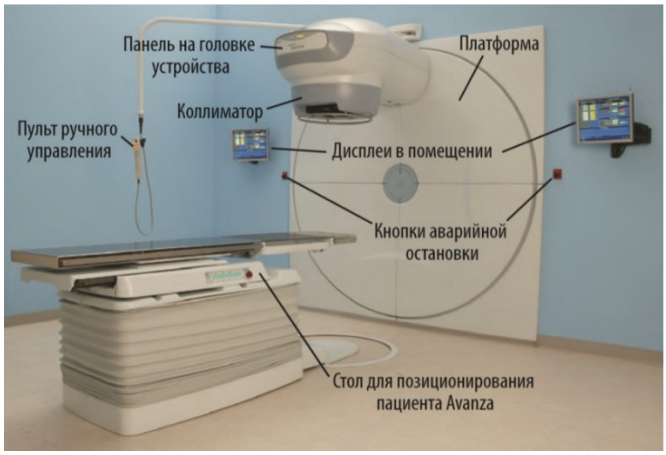


Рис.1 Гамма-терапевтический аппарат TheratronEquinox

Суть эксперимента заключалась в том, что используя различные поля для измерения внутрь фантома, на разные глубины помещается цилиндрическая ионизационная камера FC65-G, которой снимаются значения полученного заряда. Данные значения заряда пересчитывают в поглощенную дозу при помощи следующей формулы:

$$D_{W,Q} = M * N_{D,W}^{Q} ,$$

где M — скорректированное значение заряда, измеренное в точке на глубине d_{max} (d_{max} – глубина в фантоме, на которой расположен максимум дозного распределения), Кл;

$$N_{D,W}^{Q}$$

— калибровочный коэффициент для ионизационной камеры, использованной в измерениях, в случае, если клинические условия, при которых проводилась дозиметрия, отличаются от стандартных лабораторных условий, при которых калибровалась данная ионизационная камера, отн. ед.

Для твердотельного фантома дополнительно необходимо произвести пересчет дозы при помощи следующей формулы:

$$D_{water} = D_{med} * \left(\frac{\bar{\mu_{en}}}{\rho}\right)_{med}^{w}$$

где $\left(\frac{\bar{\mu_{en}}}{\rho}\right)_{med}^{w}$ - отношение усреднённых массовых энергетических коэффициентов поглощения для воды и для материала фантома [3].

После проведения эксперимента и обработки полученных данных было произведено моделирование глубинного распределения дозы внутри фантома в программа PCLab. Данная программа

предназначена для моделирования методом Монте-Карло процессов распространения электронов, позитронов, фотонов и протонов в веществе, визуализация этих процессов распространения на экране дисплея и получение численных результатов взаимодействия (например, альбедо, коэффициентов пропускания частиц, энергетических и угловых распределений частиц, распределений поглощенной энергии в веществе, дозы за защитой и т. д.).

После этого экспериментальная часть и моделирование повторяются на рентгеновском аппарата Xstrahl 300 в тех же условий, что и в первой части эксперимента. Рентгеновский аппарат Xstrahl 300 - мощное рентгенотерапевтическое устройство предназначенное для лечения доброкачественных и злокачественных опухолей с помощью направленного рентгеновского излучения. В аппарате Xstrahl 300 используется металло-керамическая рентгеновская трубка медицинского назначения на 300 кВ.

Полученные при моделировании данные сравниваем с полученными данными в результате эксперимента.

Результаты. После этапа моделирования в эксперименте с источником ^{60}Co строим график зависимости поглощенной дозы от глубины фантома для каждого размера поля. На один график помещаем результаты эксперимента и моделирования в водном фантоме. На другой график помещаем результаты моделирования и эксперимента в твердотельном фантоме с учетом и без учета усреднённого массового энергетического коэффициента поглощения.

Из полученных графиков видно, что данные в эксперименте и моделировании практически совпадают. Это значит, что данная программа пригодна для моделирования и можно приступать к следующей части исследования.

На следующем этапе проделываем идентичные действия для рентгеновского излучения. Получаем один график с результатами эксперимента и моделирования в водном фантоме и другой график с результатами эксперимента и моделирования в твердотельном фантоме. Из графиков видно, что глубинное распределение дозы, полученное при моделировании практически совпадает с глубинным распределением дозы, полученном в эксперименте.

После чего на одном сравнительном графике приводим данные, полученные в результате эксперимента в водном фантоме и в твердотельном фантоме с учетом и без учета усредненного массового энергетического коэффициента пересчета из воды в материал фантома. Сравнивая полученные графики можно видеть, что глубинные распределения дозы в водном и твердотельном (с учетом коэффициента пересчета) фантомах практически идентичны, то есть разница не превышает 3%.

Заключение. На основе приведенных выше результатов исследования можно сделать вывод о том, что в клинической дозиметрии на ровне с водным фантомом (который является «золотым стандартом») возможно применение твердотельного фантома SP34 для ортовольтного рентгеновского излучения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. User's Guide - SP34 QA Phantome. - Schwazenbruck: IBA Dosimetry GmbH, 2011.
2. Руководство пользователя Theratron Equinox. - IN/OM2068(RUS) - Канада: 2008. - С. 159.
3. ICRU Report 62, Prescribing, Recording and Reporting Photon Beam Therapy (Supplement to ICRU Report 50). - USA, 2010. - pp. 31-38.

АТОМНАЯ СТРУКТУРА СИСТЕМЫ НИКЕЛЬ–ВОДОРОД ПРИ РАЗЛИЧНОЙ КОНЦЕНТРАЦИИ ВОДОРОДА

У Мэняо

Научный руководитель: Л.А. Святкин

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: 2113400552@qq.com

ATOMIC STRUCTURE OF NICKEL–HYDROGEN SYSTEM AT DIFFERENT HYDROGEN CONCENTRATIONS

Wu Mengyao

Scientific Supervisor: L.A. Svyatkin

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

E-mail: 2113400552@qq.com

Abstract. *The results of first-principle calculations of atomic structure of nickel–hydrogen system at different concentrations of hydrogen in nickel have been presented. The magnetic moment of the system, lattice parameters and dissolution energy of hydrogen in nickel have been calculated. At low hydrogen concentration, the minimal value of dissolution energy corresponds to octahedral coordination of hydrogen atoms. In addition, the displacement of hydrogen atoms in nearest interstitial sites of nickel lattice is energetically preferable.*

Введение. Взаимодействие водорода с переходными металлами является темой многочисленных исследований. Научный интерес, в частности, представляет взаимодействие водорода с никелем. Никель широко используется для изготовления защитных покрытий от коррозии в химически активных средах. Эти покрытия часто подвергается интенсивному воздействию водородом, в результате чего возникает их водородное охрупчивание. Для понимания особенностей взаимодействия водорода с никелем на микроскопическом уровне необходимо изучить атомную и электронную структуру системы никель–водород. Целью настоящего исследования явилось изучение из первых принципов атомной структуры системы никель–водород в зависимости от положения и концентрации примеси в никеле.

Метод и детали расчета. В работе в рамках теории функционала электронной плотности методами псевдопотенциала и проекционных плоских волн, реализованными в пакете программ ABINIT [1], была проведена оптимизация параметров решетки и релаксация положений всех атомов в расчетной ячейке чистого никеля и системы никель–водород. Обменно-корреляционные эффекты рассматривались в приближении градиентного потенциала PBE [2]. Самосогласование считалось достигнутым, когда сходимости полной энергии составляла ~ 0,03 мэВ. Релаксация решетки считалась завершенной, когда силы, действующие на каждый атом расчетной ячейки, становились меньше 50 мэВ/Å. Набор k-точек составлял 7×7×10 и 14×14×5 для твердых растворов Ni_8H и Ni_4H, соответственно и 14×14×10 для твердых растворов Ni_2H, NiH и NiH_2.

В твердых растворах Ni_8H, Ni_4H и Ni_2H атом H размещался равномерно по кристаллу либо в тетраэдрических T, либо в октаэдрических O междоузлиях. В случае твердого раствора NiH_2 мы

рассмотрели ситуацию, когда атомы водорода занимает два ближайших друг к другу октаэдрических междоузлия ($Ni_4H_2^{Облиз}$). В твердом растворе NiH, водород размещался либо в октаэдрических междоузлиях ($Ni_2H_2^O$), либо в тетраэдрических междоузлиях (были рассмотрены две разные конфигурации $Ni_2H_2^T$ и $Ni_2H_2^{Тдиаг}$), либо в обоих междоузлиях одновременно ($Ni_2H^TH^O$). В случае твердого раствора NiH_2 были рассмотрены четыре конфигурации атомов водорода в решетке никеля ($Ni_2H_2^OH_2^T$, $Ni_2H_2^OH_2^{Тдиаг}$, $Ni_2H_3^TH_1^O$ и $Ni_2H_4^T$).

Результаты и выводы. Поскольку никель является по природе своей ферромагнитным материалом, то также представляет интерес исследование влияния водорода на магнитный момент никеля. В таблица 1 представлены параметры решетки и магнитные моменты всех рассмотренных систем. Отметим хорошее согласие рассчитанного магнитного момента никеля ($0{,}655\mu_Б$) с результатами других расчетов [3]. Из таблицы видно, что рост концентрации водорода в никеле приводит к уменьшению его магнитного момента. В твердом растворе NiH магнитный момент обращается в ноль, т.е. твердый раствор NiH является парамагнитным. Полученные в работе параметров решетки чистого Ni хорошо согласуются с результатами других экспериментальных и теоретических работ [4,5]. Анализ результатов в таблице 1 показал, что при растворении водорода в никеле с относительной концентрацией X = H/Ni = 0,125–0,5 изменение параметров решетки металла составляет 0,7–8,6 %. При более высокой концентрации ($X \geq 1{,}0$) изменение параметров решетки более значительны: так, один из параметров решетки $Ni_2H_2^OH_2^T$ отличается от параметра решетки чистого Ni на 42,7%. Отметим, что в большинстве рассмотренных случаев наблюдается тетрагональное искажение решетки кристалла. Особенно ярко это проявляется в твердых растворах Ni_2H, NiH и NiH_2, когда атом водорода находится либо только в тетраэдрических, либо и в тетраэдрических и в октаэдрических междоузлиях.

Таблица 1

Магнитный момент и параметры решетки системы Ni–H

Система	Параметры решетки	Магнитный момент ячейки, e/Бор^3/атом	Система	Параметры решетки	Магнитный момент ячейки, e/Бор^3/атом
Ni	$a = c$ = 3,525Å $a = c$ = 3,522Å [4] $a = c$= 3,524Å [5]	0,655 0,65 [3]	$Ni_2H_2^O$	$a = c$ = 3,729Å	0
Ni_8H^O	$a = b$ = 3,551Å c = 3,559Å	0,4825	$Ni_2H_2^T$	$a = b$ = 3,709Å c = 4,128Å	0
Ni_8H^T	$a = b$ = 3,570Å c = 3,560Å	0,4741	$Ni_2H_2^{Тдиаг}$	$a = b$ = 3,852Å c = 3,821Å	0
Ni_4H^O	$a = b$ = 3,597Å c = 3,555Å	0,3930	$Ni_2H^TH^O$	a = 3,552Å b = 3,408Å c = 3,841Å	0
Ni_4H^T	$a = b$ = 3,588Å c = 3,645 Å	0,3626	$Ni_2H_2^OH_2^T$	$a = b$ = 3,342Å c = 5,032Å	0
$Ni_4H_2^{Облиз}$	$a = b$ = 3,450Å c = 3,555Å	0,3153	$Ni_2H_2^OH_2^{Тдиаг}$	$a = b$ = 3,806Å c = 3,793Å	0
Ni_2H^O	$a = c$ = 3,638Å	0,2440	$Ni_2H_3^TH_1^O$	a = 3,867Å b = 3,760Å c = 3,952Å	0
Ni_2H^T	$a = b$ = 3,618Å c = 3,828Å	0,1906	$Ni_2H_4^T$	$a = b$ = 3,852Å c = 3,841Å	0

В работе также рассчитана энергия растворения E_H водорода в никеле по формуле:

$$E_{\text{H}} = E(\text{Ni}_{\text{N}}\text{H}_{\text{m}}) - E(\text{Ni}_{\text{N}}) - \frac{m}{2}E(\text{H}_2),$$

где $E(\text{Ni}_\text{N})$ и $E(\text{Ni}_\text{N}\text{H}_\text{m})$ – полные энергии чистого Ni и твердого раствора $\text{Ni}_\text{N}\text{H}_\text{m}$ с относительной концентрацией атомов водорода $X = m/N$, где N и m – количество атомов никеля и водорода, соответственно, в расчетной ячейке, $E(\text{H}_2)$ – энергия молекулы водорода. Результаты расчетов представлены на рис. 1.

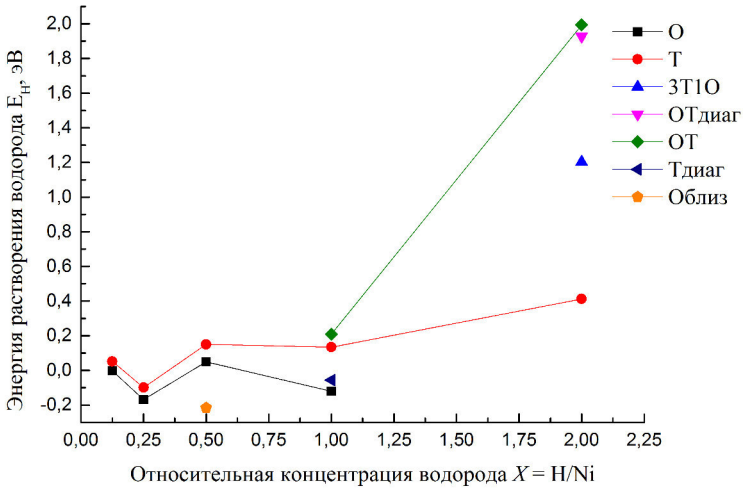


Рис. 1. Зависимость энергии растворения E_H водорода в никеле от концентрации и положения атомов водорода в решетке металла

Из рисунка 1 видно, что при относительной концентрации водорода в никеле от X = H/Ni = 0,125 до X = 1,0, ему энергетически выгодно занимать в решетке никеля октаэдрические междоузлия. При этих концентрациях энергия растворения водорода в никеле варьируется от -0,25 до 0,25 эВ. Отметим, что в твердом растворе Ni_2H при размещении атомов H в ближайших октаэдрических междоузлиях энергии растворения водорода минимальна из всех рассмотренных случаев. Т.е. атомам водорода при данной концентрации (X = 0,5) энергетически выгоднее занимать октаэдрические междоузлия ближайшие друг к другу ($\text{Ni}_4\text{H}_2^{\text{Облиз}}$), чем равномерно распределятся по объему кристалла ($\text{Ni}_2\text{H}^{\text{O}}$). Из рисунка 1 также видно, что растворение водорода в никеле до относительной концентрации X = 2,0 требует энергии от 0,35 эВ и выше. Минимальная энергия растворения в этом случае соответствует тетраэдрической координации атомов водорода.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. ABINIT – abinit [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://www.abinit.org – 21.12.16.
2. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple // Phys. Rev. Lett. – 1996. – Vol. 77. – № 18. – P. 3865-3868.
3. Singh R., Kroll P. Structural, electronic, and magnetic properties of 13-, 55-, and 147-atom clusters of Fe, Co, and Ni: A spin-polarized density functional study // Phys. Rev. B. – 2008. – Vol. 78. – P. 245404(1)-245404(12).
4. Janko A., Pielaszek J. Lattice spacing determination for the α and β phases of nickel-hydrogen and nickel-deuterium systems // Bull. Acad. Polon. Sci. – 1967. – Vol. 15. – P. 569–572.
5. Diabb J., Juárez-Hernandez A., Colas R., Castillo A.G., García-Sanchez E., Hernandez-Rodriguez M.A.L., Boron influence on wear resistance in nickel-based alloys. // Wear. – 2009. – Vol. 267. – P. 550–555.

РАСПРЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ В СИСТЕМЕ НИКЕЛЬ–ВОДОРОД

У Мэняо

Научный руководитель: Л.А. Святкин

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: 2113400552@qq.com

ELECTRON DENSITY DISTRIBUTION IN NICKEL–HYDROGEN SYSTEM

Wu Mengyao

Scientific Supervisor: L.A. Svyatkin

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

E-mail: 2113400552@qq.com

Abstract. *The results of first-principle calculations of electron density distribution and density difference between electrons with different spins in the Ni-H system is presented. Placements of hydrogen in the interstitial sites of nickel lattice leads to an increase in the covalent component of the chemical bond between the nearest H and Ni atoms. Analysis of the difference in the density of electrons with spin up and spin down in the Ni-H system shows that with increasing hydrogen concentration in nickel this difference of electron density in an interstitial region decreases.*

Введение. Исследование системы никель–водород представляет интерес, поскольку никель широко используется для изготовления защитных покрытий от коррозии в химически активных средах и часто подвергается интенсивному воздействию водородом. Растворение и накопление водорода в никеле приводит к водородному охрупчиванию материала. Для понимания особенностей взаимодействия водорода с никелем на микроскопическом уровне необходимо изучить атомную и электронную структуру системы никель–водород. Целью настоящего исследования явилось изучение из первых принципов распределение электронной плотности в системы никель–водород в зависимости от положения и концентрации примеси в никеле.

Метод и детали расчета. В работе в рамках теории функционала электронной плотности методами псевдопотенциала и проекционных плоских волн, реализованными в пакете программ ABINIT [1], была проведена оптимизация параметров решетки и релаксация положений всех атомов в расчетной ячейке чистого никеля и системы никель–водород с относительной концентрацией атомов водорода X = H/Ni равной 0,125 и 1,0. Обменно-корреляционные эффекты рассматривались в приближении градиентного потенциала PBE [2]. Самосогласование считалось достигнутым, когда сходимости полной энергии составляла ~ 0,03 мэВ. Релаксация решетки считалась завершенной, когда силы, действующие на каждый атом расчетной ячейки, становились меньше 50 мэВ/Å. Набор k-точек составлял 7×7×10 для твердого раствора Ni_8H и 14×14×10 для чистого Ni и твердого раствора NiH. Распределение электронной плотности было рассчитано в чистом Ni и в твердых растворах Ni_8H и NiH, в которых атомы водород размещались либо в октаэдрических, либо в тетраэдрических междоузлиях. В работе также была вычислена разность плотностей электронов со спином вверх и со спином вниз.

Результаты и выводы. Результаты расчетов распределения электронной плотности и разности плотностей электронов со спинами вверх и вниз для чистого никеля представлены на рис. 1. Из рис. 1*б* видно, что в чистом никеле в области каждого атома есть максимум положительной разности плотности электронов со спином вверх и со спином вниз (красные пятна), а в межатомной области кристалла разность плотности электронов со спином вверх и со спином вниз имеет отрицательное значение.

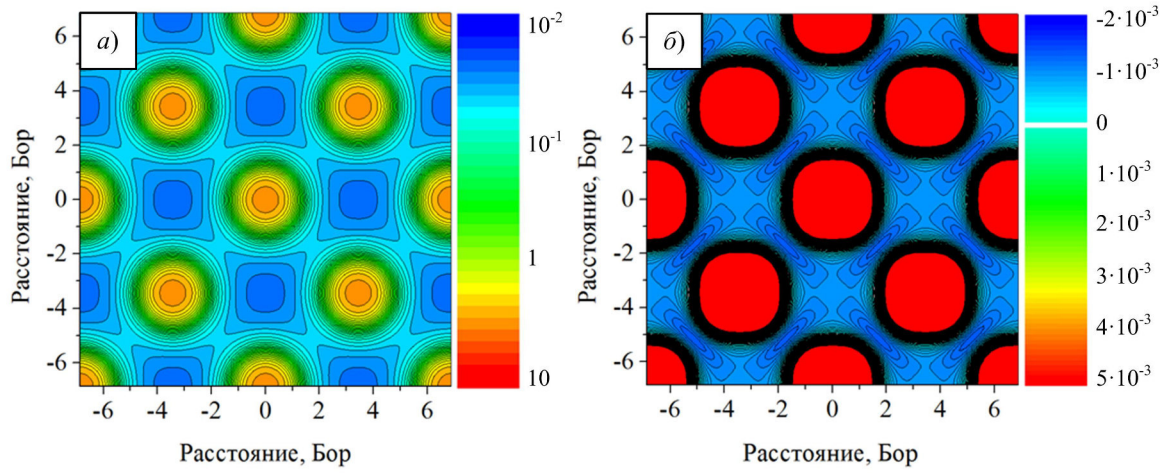


Рис. 1. Распределение электронной плотности (а) и разность плотностей электронов со спинами вверх и вниз (б) в плоскости (200) чистого Ni

Расчеты полной энергии системы Ni–H показали, что при концентрациях водорода в никеле X = 0,125 (твердый раствор Ni_8H) и X = 1,0 (твердый раствор NiH) атому H энергетически более выгодно занимать октаэдрические междоузлия в решетке металла. Поэтому на рис. 2 и 3 представлено распределение электронной плотности и разности плотностей электронов со спином вверх и со спином вниз в твердых растворах Ni_8H и NiH с октаэдрической координацией атомов водорода.

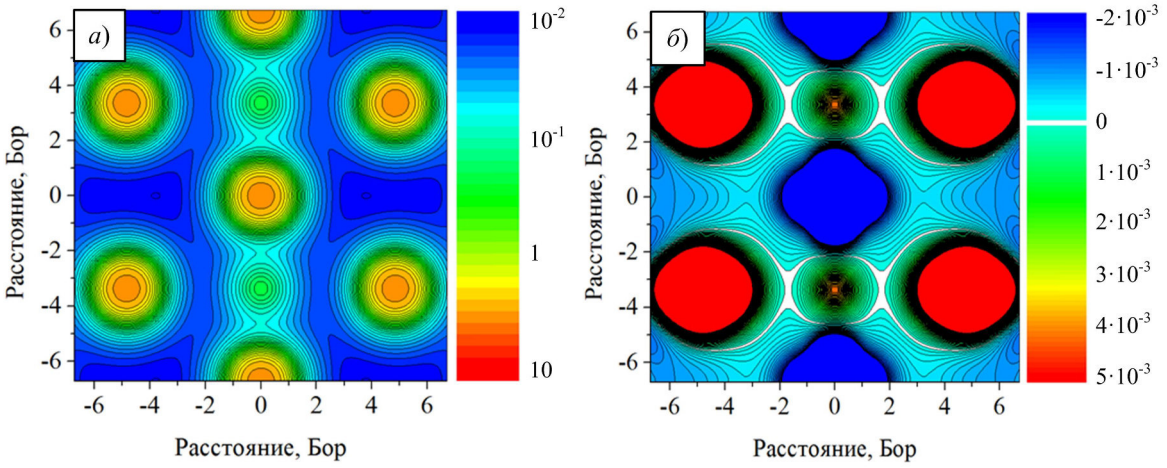


Рис. 2. Распределение электронной плотности (а) и разность плотностей электронов со спинами вверх и вниз (б) в плоскости (200) твердого раствора Ni_8H *с октаэдрической координацией атомов H*

Из рис. 2*а* видно, что размещение атома водорода в октаэдрических междоузлиях никеля с концентрацией X = 0,125 (рис. 2*а*) приводит к возникновению общих изолиний распределения электронной плотности, охватывающих атомы H и ближайшие к ним атомы Ni, что указывает на усиление ковалентной составляющей химической связи между атомами. При этом на этих атомах Ni наблюдаются большие области с отрицательной разностью плотностей электронов со спинами вверх и

вниз (рис. 2*б*), что говорит о перемагничивании этих атомов. Вдали от атомов водорода наблюдается распределение зарядовой плотности разности плотностей электронов со спинами вверх и вниз такое же, как и в чистом Ni. Анализ распределения электронной плотности в Ni_8H с тетраэдрической координацией атомов водорода показал, что общих изолиний, охватывающих соседние атомы Ni и H, меньше, что говорит о более слабой связи водорода в этих междоузлиях по сравнению с октаэдрическими. Также при тетраэдрической координации атомов водорода на всех атомах никеля разность плотностей электронов со спином вверх и вниз имеет положительные значения как в чистом никеле, а на атомах водорода эта разность принимает отрицательные значения. Стоит отметить, что размещение водорода в никеле с относительной концентрацией X = H/Ni = 0,125 значительно понижает уровень электронной плотности в межатомной области кристалла.

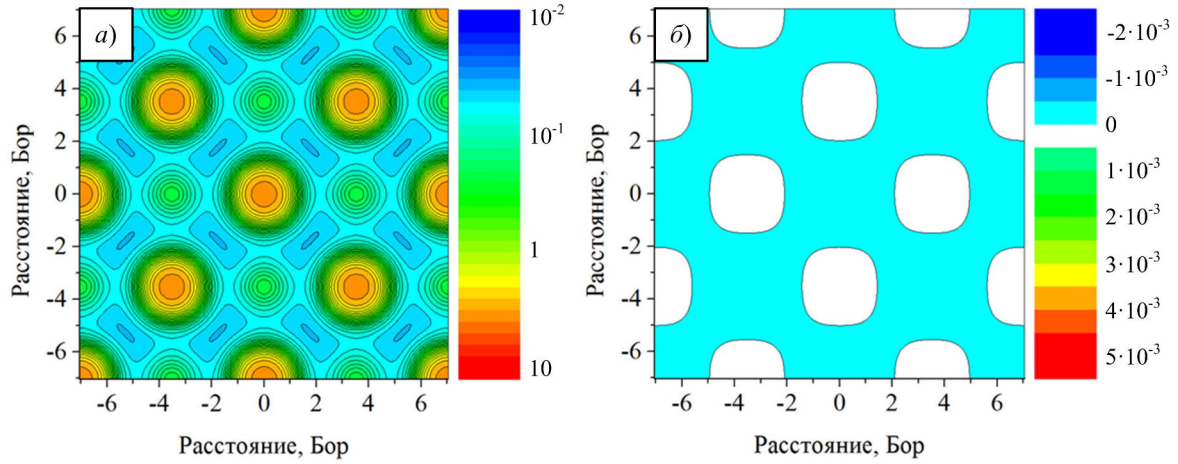


Рис. 3. Распределение электронной плотности (а) и разность плотностей электронов со спинами вверх и вниз (б) в плоскости (200) твердого раствора NiH *с октаэдрической координацией атомов H*

Анализ рис. 1*а* и 3*а* показал, что уровень электронной плотности в межатомной области твердого раствора NiH с октаэдрической координацией атомов водорода значительно выше, чем в чистом Ni. Однако общие контуры изолиний между соседними атомами H и Ni, наблюдаемые в твердом растворе Ni_8H (рис. 2*а*), в твердом растворе NiH отсутствуют (рис. 3*а*). При тетраэдрической координации атомов водорода распределение электронной плотности в твердом растворе NiH имеет качественно такой же вид, как и в твердом растворе Ni_8H с октаэдрической координацией атомов водорода (рис. 2*а*). Анализ распределения разности плотностей электронов со спином вверх и со спином вниз в системе Ni–H, показал, что с ростом концентрации водорода в никеле разность плотностей электронов со спином вверх и со спином вниз в межатомной области уменьшается. При относительной концентрации водорода X = 1,0 эта разность плотностей во всем кристалле близка к нулю, что свидетельствует об исчезновении магнитного момента (рис. 3*б*). Магнитный момент атома водорода сильно зависит от его расположения в решетке никеля.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. ABINIT – abinit [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://www.abinit.org – 21.12.16.
2. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple // Phys. Rev. Lett. – 1996. – Vol. 77. – № 18. – P. 3865-3868.

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ПРОЦЕССА МИКРОДУГОВОГО ОКСИДИРОВАНИЯ НА СВОЙСТВА АНТИБАКТЕРИАЛЬНЫХ СЕРЕБРОСОДЕРЖАЩИХ КАЛЬЦИЙФОСФАТНЫХ ПОКРЫТИЙ

А.В. Угодчикова

Научный руководитель: доцент, д.т.н. М.Б. Седельникова

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: ugodch99@gmail.com

INFLUENCE OF THE MICROARC OXYDATION PROCESS PARAMETERS ON PROPERTIES OF ANTIBACTERIAL AG- CONTAINING CALCIUM PHOSPHATE COATINGS

A.V. Ugodchikova

Scientific Supervisor: Assoc. Prof., Dr. M.B. Sedelnikova

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

E-mail: ugodch99@gmail.com

Abstract. *Investigations of microarc Ag-inclusive calcium phosphate biocoatings on the pure titanium (Ti) and Ti–40 мас.% Nb (Ti – 40Nb) alloy were presented. The dependences of the coating properties on the microarc oxidation parameters were found. A variation of the process parameters allowed producing biocoatings with thickness 13–40 μm, roughness 2,0–3,3 μm, silver content up to the 0,82 at.% and with the high hydrophilic properties.*

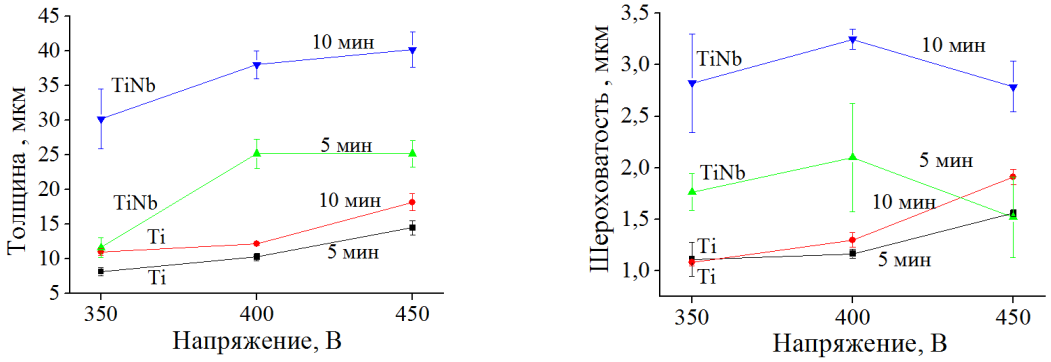
Введение. Разработка новых материалов медицинского назначения, предназначенных для контакта со средой живого организма, является важной задачей. К настоящему времени разработано несколько десятков методов формирования биосовместимых с живой тканью покрытий на поверхности металлических имплантатов [1]. В последнее десятилетие всё большее распространение приобретает метод микродугового оксидирования (МДО), так как позволяет получать пористые покрытия с толщиной до сотен микрометров, имеющие хорошее сцепление с поверхностью обрабатываемого металла. Бактерицидное и противовоспалительное действия имплантационных материалов связаны с наличием в их составе химических элементов, обладающих природным свойством антисептики. К числу таких микроэлементов относятся серебро Ag, находящееся в материале в виде свободных частиц, или в связанном химическом состоянии [3].

Целью данной работы является получение методом МДО серебросодержащих кальцийфосфатных (КФ) покрытий, исследование влияния параметров процесса МДО на свойства покрытий.

Материалы и методы исследования. Для проведения экспериментов были подготовлены образцы – металлические пластинки размером 10×10×1 мм из титана (ВТ1-0) и сплава Ti–40 мас.% Nb. В состав электролита для получения Ag-содержащих КФ покрытий методом МДО входили следующие компоненты: Na_2HPO_4, β-$Ca_3(PO_4)_2$, NaOH, и $AgNO_3$. Нанесение покрытий осуществлялось на установке «Micro Arc 3.0 System» в ИФПМ СО РАН [1]. Покрытия наносили в анодном потенциостатическом

режиме, основные параметры процесса МДО варьировали в следующих пределах: напряжение 350 – 450 В, частота следования импульсов 50-100 Гц, длительность импульсов 100 – 500 мкс. Шероховатость поверхности покрытий исследовали по параметру Ra (ГОСТ 2789-73) на профилометре-296 (ИФПМ СО РАН, г. Томск). Гидрофильные свойства покрытий определяли на установке «EasyDrop» (Krüss) путем измерения краевого угла смачивания водой и глицерином. Элементный состав КФ покрытий определяли методом РЭМ (SEM 515 Philips с приставкой для энергодисперсионного анализа, ТРЦКП ТГУ, г. Томск).

Описание результатов и обсуждение. Исследования показали, что толщина Ag-содержащих КФ покрытий увеличивается почти линейно до 40 мкм, при повышении напряжения процесса МДО (Рис. 1 а). Значения параметра R_a для покрытий на титане меняются незначительно от 1,0 до 2,0 мкм, в диапазоне напряжений 350–450 В (Рис. 1 б). Для покрытий на сплаве Ti–40Nb, нанесённых при длительности процесса 10 мин, характерны более высокие значения шероховатости, равные 2,7–3,3 мкм.



(а) (б)

Рис. 1. Графики зависимости свойств Ag-содержащих кальцийфосфатных покрытий: толщины (а) и шероховатости (б) от напряжения процесса МДО

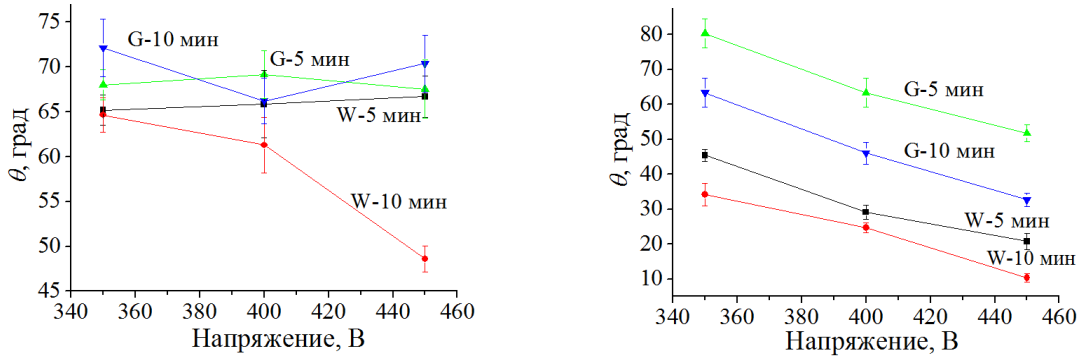
Анализ элементного состава покрытий показал, что при увеличении напряжения процесса МДО от 350 до 450 В содержание Ag в покрытиях растёт от 0,19 до 0,82 ат.% (табл. 1). Количество Ag в покрытиях на титане почти в три раза превышает содержание Ag в покрытиях на сплаве Ti–40Nb. В литературных источниках есть сведения о том, что даже малые концентрации серебра в диапазоне 1,0–3,5 ат.% могут обеспечивать значительный антибактериальный эффект [4]. Отношение Ca/P для Ag-содержащих кальцийфосфатных покрытий на титане и сплаве Ti–40Nb увеличивается до 1,37 и 1,47 соответственно, при повышении напряжения процесса МДО до 450 В.

Таблица 1.

Элементный состав Ag-содержащих кальцийфосфатных МДО покрытий

Элемент	Содержание элементов в покрытиях (ат.%)			
	Подложка Ti		Подложка Ti-Nb	
	350 В	450 В	350 В	450 В
C	32,65	20,30	27,41	19,58
O	40,87	35,77	49,02	35,64
P	19,78	18,16	20,94	17,94
Ag	0,60	0,82	0,19	0,37
Ca	6,10	24,96	2,44	26,46
Ca/P	0,31	1,37	0,12	1,47

В ходе экспериментов были определены гидрофильные свойства КФ покрытий. Значения краевых углов смачивания водой и глицерином покрытий на титане (рис.2 а) находятся в пределах 65-73 град. Краевые углы смачивания водой покрытий на титане, нанесённых в течение 10 мин, уменьшаются линейно до 48 град с повышением напряжения процесса МДО до 450 В. Значения краевых углов смачивания водой и глицерином Ag-содержащих КФ покрытий на сплаве Ti–40Nb (рис. 2 б) также уменьшаются линейно с ростом напряжения процесса. Для покрытий, нанесённых при длительности процесса 10 мин характерны минимальные углы смачивания водой – 10 град и глицерином – 35 град,что указывает на высокую гидрофильность данных покрытий.



(а) (б)

Рис. 2. Графики зависимости краевых углов смачивания Ag-содержащих КФ покрытий на поверхности титана (а) и сплаваTi-40Nb (б) от напряжения процесса МДО, W – вода, G – глицерин

Выводы. Проведенные исследования показали, что с ростом напряжения происходит более интенсивное образование микроплазменных разрядов на поверхности изделия, что приводит к росту его толщины до 40 мкм и шероховатости до 3,3 мкм. При этом улучшаются гидрофильные свойства покрытий. Рост напряжения процесса МДО от 350 до 450 В способствует увеличению содержания серебра в покрытиях от 0,19 до 0,82 ат.%. Наиболее высокое содержание серебра наблюдается в покрытиях на титановых подложках. Отношение Ca/P увеличивается до 1.47 при повышении напряжения процесса МДО до 450 В.

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, Structure and properties of microarc calcium phosphate coatings on the surface of titanium and zirconium alloys, Russian Physics Journal. 2014.V.56 (10).P.1130-1136.
2. Родионов И.В., Бутовский К.Г., Бейдик О.В., Сурменко Е.Л. Оксидные биопокрытия с антисептическими и антитромбогенными свойствами на чрескостных фиксаторах в аппаратах остеосинтеза // Биомедицинская радиоэлектроника. – 2008. – №8-9. – С. 98–101.
3. VenkateswarluKotharu, RameshbabuNagumothu, ChandraBoseArumugam, MuthupandiVeerappan, ubramanianSankaran, ThajuddinNooruddin. Fabrication of corrosion resistant, bioactive and antibacterial silver substituted hydroxyapatite/titania composite coating on Cp Ti. CeramicsInternational (2012) 731–740.

КОНЦЕНТРАЦИОННЫЕ И ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ТЕПЛОЕМКОСТИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ С ПРИМЕСЯМИ ПЕРЕХОДНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

В.А. Улитко

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. Е.А. Памятных

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,

Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19, 620002

E-mail: vasily.ulitko@gmail.com

CONCENTRATION AND TEMPERATURE DEPENDENCES OF THE HEAT CAPACITY OF SEMICONDUCTORS WITH ADMIXTURES OF TRANSITION ELEMENTS

V.A. Ulitko

Scientific Supervisor: Prof., Dr. E.A. Pamyatnyh

Ural Federal University, Russia, Yekaterinburg, Mira str., 19, 620002

E-mail: vasily.ulitko@gmail.com

Abstract. *Regularities in the formation and features of the electronic structure of impurities of transition elements belong to topical problems in the physics of doped semiconductors. Alloying semiconductors with impurities of transition elements cause to hybridization of electronic states. This work presents the aspects of Fermi-liquid formalism in the context of hybridized electronic state. In other works the anomal temperature dependences in heat capacity was detected. In this work we identified some concentration regimes in which this anomal dependences can be observed.*

Введение. Определение особенностей электронной структуры примесей переходных элементов относится к кругу актуальных проблем физики легированных полупроводников. Важность задачи связана с необходимостью обоснованного описания характерных явлений (электронной локализации, спинового упорядочения и других) в полупроводниковых системах данного типа, которые стали передовыми объектами физических исследований и технических приложений.

В ходе исследований в этой области реализуется описание интеграции электронных оболочек атомов примеси и кристалла-матрицы. Важным аспектом является появление гибридизированных состояний, электронная плотность в которых частично локализована на ионе примеси и вместе с тем однородно распределена по кристаллу.

Математическая модель. Попадание атомных уровней примесей в полосу проводимости кристалла, приводит к гибридизации электронных состояний. Гибридизация происходит в конечном интервале энергий вблизи резонансного уровня ε_r, ширина которого 2Γ определяется параметрами потенциала примесей [1, 2]. При этом плотность распределения новых состояний по энергии $g(\varepsilon)$ включает часть $g_e(\varepsilon)$, отвечающую свободному движению, и немонотонную часть $g_r(\varepsilon)$ в виде лоренцевского пика шириной 2Δ :

$$g(\varepsilon) = g_e(\varepsilon) + g_r(\varepsilon) \ ,$$

$$g_r(\varepsilon) = \{\frac{1}{\pi}\frac{\Delta}{(\varepsilon-\varepsilon_r)^2+\Delta^2} + \frac{1}{\Gamma}\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} arctg\frac{\Gamma}{\Delta}\right)\} n_d \ ,$$

где n_d - концентрация донорных электронов, равная произведению концентрации примесей n_i на число электронов ν_d, отданных каждой примесью: $n_d = n_i \nu_d$, 2Δ - ширина резонансного уровня. Последнее слагаемое здесь учитывает конечность резонансного интервала, определяемую условием возможности выделения резонансного вклада в виде лоренцевского пика. Параметр Γ выбирается при этом так, чтобы концентрация электронов, испытывающих резонансное рассеяние, равнялась концентрации донорных электронов:

$$\int_{\varepsilon_r-\Gamma}^{\varepsilon_r+\Gamma} d\varepsilon \, g_r(\varepsilon) = n_d = n_i \nu_d \ .$$

Если энергия Ферми электронов при изменении концентрации доноров оказывается в интервале гибридизации, то низкотемпературные зависимости термодинамических и кинетических величин от концентрации примесей и температуры обнаруживают аномальное немонотонное поведение. Теоретическое описание такого рода эффектов на примере некоторых конкретных характеристик развито в работах [1-3], а экспериментальные данные, подтверждающие их наблюдение, приведены в статье [4].

Результаты. Для температурной зависимости термодинамических величин (и теплоемкости, в частности) существенными являются два момента. Прежде всего, это сам лоренцевский пик в плотности распределения состояний по энергии с максимумом на энергии резонансного уровня ε_r. Вторым важным моментом является конечность резонансного интервала.Поэтому температурные зависимости теплоемкости оказываются различными в зависимости от положения уровня Ферми (а, стало быть, и от концентрации примесей) по отношению к резонансному уровню и границам резонансного интервала.

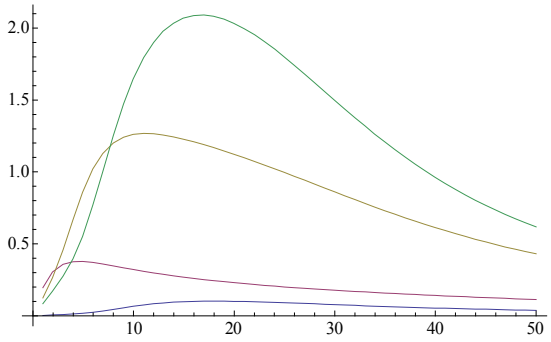


Рис. 1. Температурные зависимости теплоемкости для концентраций примесей, отвечающих положению уровня Ферми вблизи резонансной энергии.

Концентрации примесей, отвечающие совпадению энергии Ферми с энергией резонансного уровня, приводят к значительному вкладу в теплоемкость, величина которого определяется параметрами лоренцевского резонансного пика в плотности распределения энергетических уровней (величиной этого пика в максимуме, параметром , определяющем его ширину). Рост температуры приводит к

сглаживанию функции распределения вблизи энергии Ферми и «резонансный» вклад в теплоемкость в этом случае будет монотонно уменьшаться, выходя на зависимость при достаточно больших температурах. Рассчитанные температурные зависимости теплоемкости для концентраций примесей, отвечающих положению энергии Ферми вблизи резонансного уровня, приведены на рис. 1 и рис. 2.

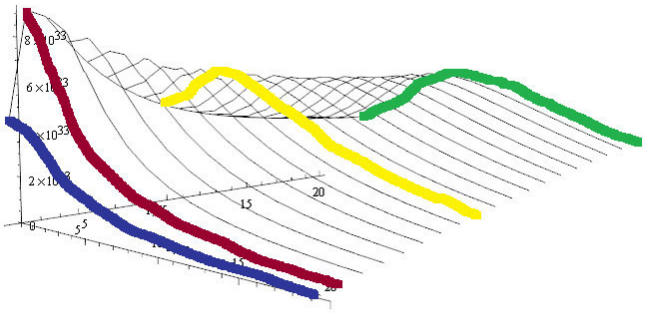


Рис. 2. Температурные зависимости теплоемкости для концентраций примесей, отвечающих положению уровня Ферми вблизи резонансной энергии. Бордовым=1 выделен график, отвечающий концентрации, для которой уровень Ферми совпадает с резонансной энергией. По оси ординат отложены значения теплоемкости, деленной на температуру в энергетических единицах.

Выводы. Проанализированы температурные и концентрационные зависимости теплоемкости для полупроводников с примесями переходных элементов в условиях гибридизации состояний. Показано, что гибридизация состояний приводит к немонотонному концентрационному и температурному поведению теплоемкости, связанному с наличием резонансного пика в плотности электронных состояний. На основе квантового ферми-жидкостного подхода, распространенного на гибридизированные состояния примесных уровней и состояний полосы проводимости в полупроводниках примесями переходных элементов, рассмотрена теплоемкость таких систем.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. В.И. Окулов, Низкотемпературная аномалия вклада в теплоемкость гибридизированных электронных состояний на примесях переходных элементов //ФНТ – 2011. Т.37. -№3. – С. 281-288
2. В.И. Окулов, Эффекты резонансного рассеяния электронов на донорных примесях в полупроводниках //ФНТ – 2004. Т.30. -№11. – С. 1194-1202
3. В.И. Окулов, К теоретическому описанию низкотемпературных эффектов в металлах и легированных полупроводниках на основе квантовой теории электронной жидкости //ФНТ – 2009. Т.35. -№8/9. – С. 891-903
4. Окулов В.И., Королёв А.В., Памятных Е.А., Гергерт А.В., Говоркова Т.Е., Паранчич С.Ю. Магнетизм гибридизированных состояний примесей ко- бальта в селениде ртути // Новые магнитные материалы микроэлектроники. Сб. трудов XX международной школы-семинара, Москва – 2006 – С.895.

АНАЛИЗ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ ПОЛОС ν_2, ν_3, ν_{12} ИЗОТОПОЛОГА ЭТИЛЕНА $^{12}C^{13}CH_4$

Л.Е. Федотов

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

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: riudzaki_l@mail.ru

ETHYLENE $^{12}C^{13}CH_4$ ISOTOPOLOGUE: HIGH RESOLUTION STUDY of ν_2, ν_3, ν_{12} FUNDAMENTALS

L.E. Fedotov

Scientific Supervisor: Prof. O.N. Ulenikov

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

E-mail: riudzaki_l@mail.ru

Abstract. *High Resolution Fourier transform infrared spectra of the $^{12}C^{13}CH_4$ molecule were recorded with Doppler limited resolution in the region of 1000 - 2000 cm^{-1} at room temperature. The measurements were carried out under several different absorption conditions using the Bruker 120 HR spectrometer. Fundamental bands ν_2, ν_3, ν_{12} were observed and found to be perturbed by different resonance interactions. About 3800 lines were assigned in the recorded spectrum.*

Введение. Колебательно-вращательные спектры молекул являются одним из наиболее полных источников информации о физико-химических свойствах молекул. Параметры спектральных линий содержат информацию о возможных энергетических состояниях молекулы, о ее электрооптических и магнитных характеристиках и многое другое. Следует отметить, что зачастую получить полную информацию о материнской молекуле затруднительно, поскольку в силу высокой симметрии не все характерные и необходимые данные возможно извлечь из анализа спектров. Объектом исследования данной работы является молекула этилена, а именно ее изотополог $^{12}C^{13}CH_4$. Необходимо отметить, что для молекулы этилена, C_2H_4, в силу симметрии почти половина полос не проявляется в поглощении. Ввиду этого, значительная часть информации о фундаментальных свойствах, связанных с этими состояниями характеристик, является недоступной. В этой связи, чрезвычайно **важным и актуальным** является исследование различных изотопологов, в данном случае, этилена. Имеющееся многообразие дейтеро- и карбоно-замещенных модификаций служит необходимым дополнением и составляет высокоточную базу для определения фундаментальных параметров колебательно-вращательного гамильтониана этилена. Под фундаментальными параметрами гамильтониана молекулы, в данном случае, подразумевается внутримолекулярное силовое поле и параметры структуры. Наряду с решением этой большой обратной спектроскопической задачи, представляющей академический интерес, самостоятельное исследование именно изотопологов этилена имеет и важное практическое значение, поскольку все изучаемые молекулы найдены в атмосферах планет Солнечной системы и в межзвездной среде. Для целей внутреннего развития методов колебательно-вращательной спектроскопии исследование изотопологов служит основой для определения изотопических соотношений между

спектроскопическими и фундаментальными параметрами, что, в свою очередь, важно для целей анализа и предсказания спектроскопических свойств молекул. В частности, в рамках данной работы на основе использования теории изотопозамещения были получены параметры резонансного взаимодействия типа Кориолиса. Необходимо отметить, что проведение анализа и корректное решение обратной спектроскопической задачи невозможно без таких оценок. Учитывая все выше изложенное, **цель данной работы** состояла в проведении анализа спектра колебательно-вращательной полосы ν_2, ν_3, ν_{12}, в оценке параметров резонансного взаимодействия на основе результатов теории изотопозамещения и в решении обратной спектроскопической задачи.

Некоторые сведения о молекуле $^{12}C^{13}CH_4$. Анализ спектра высокого разрешения полос ν_2, ν_3, ν_{12}. Группа симметрии молекулы $^{12}C^{13}CH_4$ (Рис. 1) изоморфна точечной группе C_{2v}, так как имеет четыре элемента симметрии, данные о которых представлены в таблице 1.

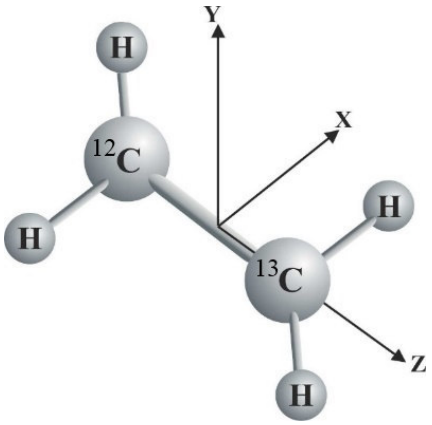


Рис. 1. Молекула $^{12}C^{13}CH_4$

В данной работе исследовались фундаментальные полосы ν_2, ν_3, ν_{12}, расположенные в области 1000-2000 см$^{-1}$. Колебательные координаты Q_2, Q_3, и Q_{12} преобразуются при операциях симметрии по неприводимым представлениям A_1 (Таблица 1). Это означает, что симметрия исследуемых состояний – A_1.

Таблица 1

Преобразование фундаментальных состояний и моментов импульсов, входящих группу C_{2v}

C_s	E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v(yz)$	Нормальные колебательные координаты	Операторы момента импульса
A_1	1	1	1	1	Q_1, Q_2, Q_3, Q_{11}, Q_{12}	
A_2	1	1	-1	-1	Q_4,	J_z,k_{zz}
B_1	1	-1	1	-1	Q_5, Q_6, Q_9, Q_{10}	J_y,k_{zy}
B_2	1	-1	-1	1	Q_7, Q_8	J_x,k_{zx}

Найденные, на основе использования метода комбинационных разностей, переходы (около 3800), подчиняющиеся правилам отбора $\Delta J = 0,\pm1$; $\Delta K_a = 0,\pm2$; $\Delta K_c = \pm1$, были отнесены к полосам ν_2, ν_3, ν_{12}. Максимальные значения квантовых чисел для найденных уровней соответствующих возбужденным состояниям ν_2, ν_3, ν_{12} равны $J^{макс.}=30/K_a^{макс.}=11$; $J^{макс.}=22/K_a^{макс.}=8$; $J^{макс.}=52/K_a^{макс.}=18$. Анализ спектра проводился на основе метода комбинационных разностей.

Детали эксперимента. Спектр высокого разрешения был получен на Фурье-спектрометре Bruker 120HR в Техническом Университете Брауншвейга (Германия). При регистрации спектра в

диапазоне 1000-2000 см$^{-1}$ использовался изотопически чистый образец $^{12}C^{13}CH_4$, при комнатной температуре.

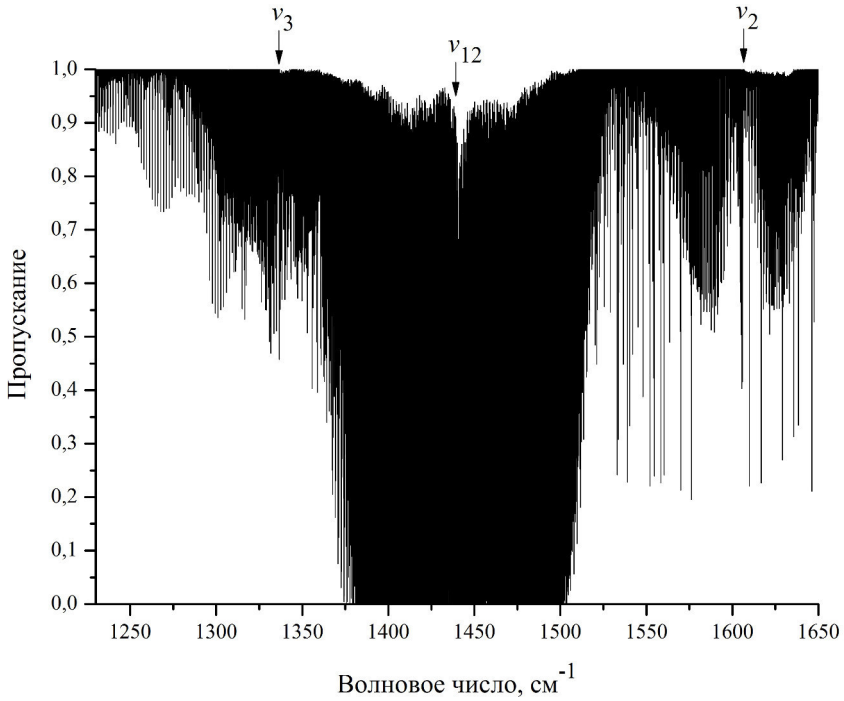


Рис. 3. Обзорный спектр высокого разрешения молекулы $^{12}C^{13}CH_4$ в диапазоне 1230 – 1650 см$^{-1}$

Заключение. В результате был проанализирован спектр высокого разрешения полос ν_2, ν_3, ν_{12} данного изотополога этилена. В итоге к полосам ν_2, ν_3, ν_{12} было отнесено около 3800 переходов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Томского политехнического университета по программе ВИУ-ФТИ-24/2016.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Gabona M.G., Tan T.L., Woo J.Q. High-resolution FTIR analysis and rotational constants for the ν12 band of ethylene-1-^{13}C ($^{13}C^{12}CH_4$) // J Mol Spectrosc.–2014. – №305. – С. 22–4.
2. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Kashirina N.V., Bauerecker S., Horneman V.M. Precise ro-vibrational analysis of molecular bands forbidden in absorption: the ν8+ν10 band of the $^{12}C_2H_4$ molecule // J Mol Spectrosc.– 2015. – № 313. – С. 4–13.
3. Ulenikov ON, Gromova OV, Aslapovskaya Yu.S., Horneman VM. High resolution spectroscopic study of C2H4: re-analysis of the ground state and v4, v7, v10, and v12 vibrational bands. // J Quant Spectrosc Radiat Transf. – 2013. – №118. – С. 14–25.

ТРИБОЛОГИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПЭТФ ТРЕКОВЫХ МЕМБРАН ПРИ СУХОМ ТРЕНИИ СКОЛЬЖЕНИЯ

Е.О. Филиппова, А.В. Филиппов
Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. В.Ф. Пичугин
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050
E-mail: bosyheo@tpu.ru

TRIBOLOGICAL CHARACTERISTICS OF PET TRACK ETCHING MEMBRANES AFTER DRY FRICTION

E.O. Filippova, A.V. Filippov
Scientific Supervisor: Prof., Dr. V.F. Pichugin
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050
E-mail: bosyheo@tpu.ru

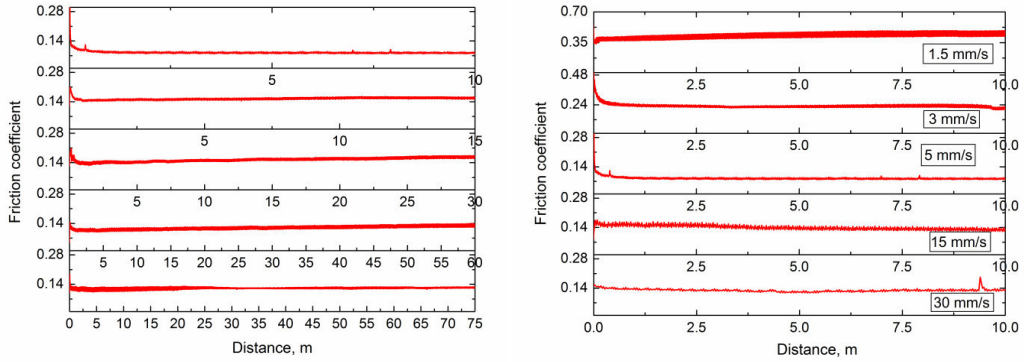
Abstract. *The article shows the research of dry friction of PET track membrane according to the pin-on-disk scheme. The results had showed that the friction coefficient increased marginally by increasing the duration of the test. The raise of tests speed more than 5 mm/s contributed to the friction coefficient increasing. The friction coefficient values were comparable in the (1,5 – 5) mm/s range. The load increasing contributed to friction coefficient increasing.*

Введение. Полиэтилентерефталат (ПЭТФ) – полимер, представитель класса полиэфиров, широко используемый в пищевой, химической промышленности, машино– и приборостроении, бытовой технике, электро- и радиотехнике [1]. Из-за высокой биосовместимости и хороших механических свойств, ПЭТФ используется в медицине (шовный материал, система доставки лекарственных препаратов, заместитель сухожилий, поддержка для культивирования клеток) [2]. ПЭФТ используется в аортокоронарном шунтировании, клеточно-тканевой инженерии [2] и офтальмологии [3]. Благодаря широкому спектру свойств ПЭТФ нашел свое применение в изготовлении трековых мембран (ТМ), а ТМ из ПЭТФ - в качестве корнеального имплантата для лечения буллезной кератопатии [4, 5]. В процессе имплантации ТМ в строму роговицы материал подвергается процессу расправления путем многократных маятникообразных движений длинных шпателей вдоль поверхностей пленки, что может повлечь ее повреждение внутри тканей роговой оболочки. В связи с этим, проведение трибологических испытаний может объективно показать воздействие металлических инструментов на поверхность мембраны при хирургических манипуляциях.

Материалы и методы исследования. В исследованиях использовались ТМ из полиэтилентерефталата толщиной 10 мкм и диаметром пор - 0,4 мкм, полученные в процессе облучения тяжелыми ионами и щелочного травления. Трибологические испытания проводились по схеме палец-диск на машине TRIBOtechnik в условиях сухого трения скольжения. ТМ закреплялась на поверхности диска с помощью зажимного приспособления. Варьировались значения длительности испытания (в диапазоне 10 м - 75 м), скорости скольжения (в диапазоне 1,5 мм/с - 30 мм/с) и нагрузки (1Н и 2Н). Тесты

с различной дистанцией выполнены при нормальной нагрузке 1Н и скорости скольжения 5 мм/с. Тесты с различной скоростью выполнены при нагрузке 1Н. Тесты с различной нагрузкой выполнены при скорости скольжения 5 мм/с. В качестве контртела использовался керамический шарик диаметром 6 мм. Анализ топографии износа ТМ выполнялся на лазерном сканирующем микроскопе Olympus LEXT OLS4100.

Результаты. На рисунке 1 приведены графики изменения коэффициента трения при различных условиях испытания.

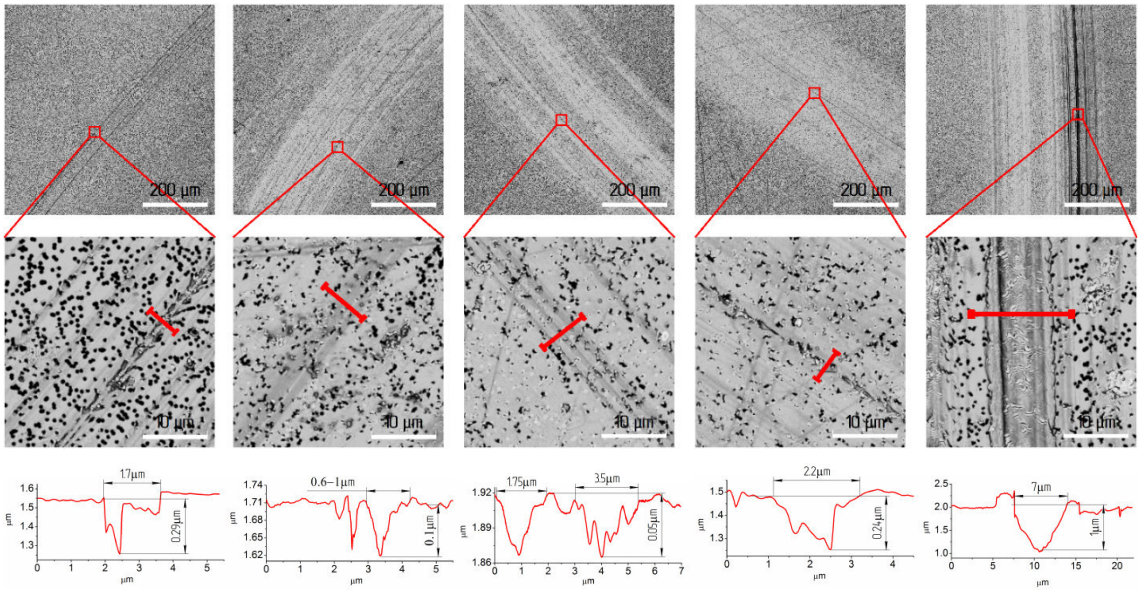


(а) (б)

Рис. 1. Зависимости изменения коэффициента трения для различного пути трения (а) и скорости скольжения (б).)

Величина коэффициента трения находится в диапазоне 0,08 – 0,17. Влияние скорости на величину выражается в увеличении коэффициента трения в 3 – 4 раза при уменьшении скорости скольжения от 5 мм/с до 1,5 мм/с. Вместе с тем в диапазоне скоростей 5 мм/с – 30 мм/с коэффициент трения увеличивается в 1,5 – 2 раза (с 0,08 до 0,16). Увеличение нагрузки способствует росту коэффициента трения до 3 раз. Изменение длительности испытания не способствует значимому изменению коэффициента трения при увеличении длины пути трения.

На рисунке 2 изображены характерные дорожки трения, сформировавшиеся на поверхности ТМ. Увеличенные фрагменты изображений иллюстрируют наиболее поврежденные области.



(a) (b) (c) (d) (e)

Рис. 2. Изображения дорожек трения после испытаний с различной длиной пути трения и профиль бороздок с увеличенных фрагментов: 10 м (a), 15 м (b), 30 м (c), 60 м (d), 75 м (e).

Согласно данным, представленным на рисунке 2, по мере увеличения длительности испытания увеличивается воздействие контртела на поверхность трековой мембраны без явно выраженной направленности: формируются «бороздки» и заглаживаются поры вследствие пластического оттеснения материала под действием контртела. Ширина бороздок увеличивается по мере увеличения длительности испытания (см. рис. 2, тест длительностью 30 м). Глубина «бороздок» изменяется не равномерно без явной зависимости от пути трения: при трении с дистанцией 30 м глубина «бороздок» составляет 0,05 мкм, а при трении с дистанцией 10 м глубина «бороздки» достигает 0,29 мкм. Большая глубина «бороздки» предположительно связана с тем, что в случае формирования единственной «бороздки» (тест с дистанцией 10 м), деформация приобретает локализованный характер и это способствует большему повреждению поверхности. В случаях образования большого количества дорожек, напряжения распределяются на большей поверхности и материал не переходит в стадию разрушения (см. рис. 2, тест длительностью 30 м), что способствует формированию меньшей глубины «бороздок» и выглаживанию поверхности трековой мембраны с частичным «замятием» пор.

Аналогичная картина формирования «бороздок» наблюдается при испытаниях с различной скоростью скольжения. Увеличение нагрузки привело к образованию более широких следов износа с большим количеством «бороздок» малой глубины, их ширина достигает 1,5 мкм.

Заключение. По результатам трибологических испытаний установлено, что выраженные следы износа материала и замятие пор наблюдается при трении с дистанцией 30 м, большей нагрузкой и со скоростью скольжения более 5 мм/с. Учитывая деликатное воздействие хирургического инструментария на имплантируемый внутрикканно материал, минимальную на него нагрузку, а также результаты трибологических тестов, хирургические шпатели, используемые при расправлении мембраны внутрикорнеально, не способствуют деформации и повреждению поверхности мембраны.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Düzyer Şebnem, Koral Koç Serpil, Hockenberger Aslı, Evke Elif, Kahveci Zeynep, Uğuz Agah Effects of different sterilization methods on polyester surfaces // Tekstil ve Konfeksiyon. – 2013. – № 23 (4). – P. 319 – 324.
2. Kang X., Xie Y., Kniss D. A. Adipose tissue model using three-dimensional cultivation of preadipocytes seeded onto fibrous polymer scaffolds // Tissue Eng. – 2005. – № 1. – P. 458 – 468.
3. Рязанцева Т.В. Эксплантодренирование ядерной мембраной в хирургии некоторых форм вторичной глаукомы (клинико экспериментальное исследование): дис. … канд. мед. наук: 14.01.07 / Рязанцева Татьяна Владимировна. – Самара, 1996. – 120 с.
4. Filippova E.O., Pichugin V.F., Sokhoreva V.V Potential use of nuclear track membranes in ophthalmology // Petroleum Chemistry. – 2014. – Vol. 54. – №. 8. – P. 669 – 672.
5. Филиппова Е.О., Кривошеина О. И., Запускалов И. В. Интрастромальная имплантация трековых полимерных мембран в лечении эндотелиально-эпителиальной дистрофии роговицы // Медицинский Вестник Башкортостана. – 2015. – Т. 10. – №. 2. – С. 137 – 139.

СТРУКТУРНАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ КОМПЛЕКСА ВОДОРОД-ВАКАНСИЯ В α-ТИТАНЕ: РАСЧЕТЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

М. Г. Фомин

Научный руководитель: Л.А. Святкин

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: mgf1@tpu.ru

STABILITY OF HYDROGEN-VACANCY COMPLEXES IN α TITANIUM: AB INITIO CALCULATIONS

M. G. Fomin

Scientific Supervisor: L.A. Svyatkin

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

E-mail: mgf1@mgf.ru

Abstract. *The results of ab initio calculations of structural stability of hydrogen-vacancy complexes in α-titanium are presented. It was shown that the presence of a vacancy in α-titanium lattice decreases the dissolution energy of hydrogen in metal. The presence of hydrogen in α-titanium decreases the formation energy of vacancy. The formation of hydrogen-vacancy complexes in α-titanium leads to significant distortion of the metal lattice.*

Введение. В течение последних десятилетий титановые сплавы стали одним из основных конструктивных материалов благодаря их свойствам, например, высокие показатели удельной прочности и жесткости, коррозионные свойства, отношение прочности к весу и т.д. Титановые сплавы широко используются в аэрокосмической, энергетической, химической, медицинской отраслях, так же в спортивной промышленности, в которых химико-механическая среда считается тяжелой с точки зрения долговечности материала. В некоторых из этих применений титан активно взаимодействует с водородом, или водой, при диссоциации которой появляется водород. Проникновение водорода в кристаллическую решетку титана и сплавов на его основе приводит к формированию вакансий. Накопление гидридов в решетке вызывает охрупчивание изделий [1]. Поведение водорода в различных металлах широко изучается при помощи средств первопринципных расчетов, чтобы понять дальнейшее поведение водорода после введение его в металл, например, взаимодействие с дефектами кристаллической решетки. Целью данной работы явилось исследование из первых принципов структурной стабильности комплекса водород-вакансия в титане с концентрацией обоих типов дефектов в решетке металла ~ 6 ат.%.

Метод и детали расчета. В рамках теории функционала электронной плотности псевдопотенциальным методом, реализованном в программном пакете ABINIT [2], проведена оптимизация параметров решетки и релаксация положений всех атомов в расчетных ячейках систем титан–водород (Ti–H), титан–вакансия (Ti–*v*) и титан–водород–вакансия (Ti–H–*v*). Обменно-корреляционные эффекты учитывались с использованием обобщенного градиентного приближения в форме Пердю-Бурке-Ернцерхофа (PBE) [3]. Самосогласование считалось достигнутым, когда изменение

потенциала составляла порядка 30 мкэВ. Релаксация считалась завершенной, когда силы, действующие на каждый атом расчетной ячейки, становились меньше 50 мэВ/Å.

Расчетные ячейки всех рассмотренных систем представляли собой блок элементарных ячеек ГПУ решетки титана 2×2×2 (рис. 1). В целях удобства обсуждения результатов атомы титана на рисунках пронумерованы. Расчетная ячейка твердого раствора Ti–H содержала 16 атомов Ti и один атом H в тетраэдрическом T или октаэдрическом O междоузлии (рис. 1*a*). В случае титана с вакансиями (Ti–*vac*) один из узлов (12) решетки *v* был вакантным, так что расчетная ячейка содержала 15 атомов Ti (рис. 1*b*). Для твердого раствора с вакансиями (Ti–H–*vac*) было рассмотрено четыре варианта размещения водорода в решетке металла: в вакансии *v* и вблизи вакансии в тетраэдрических T1, T2 и октаэдрическом O междоузлиях (рис. 1*b*). Рассмотренные тетраэдрические междоузлия, как видно из рис. 1*b*, отличаются друг от друга своим положением относительно вакансии.

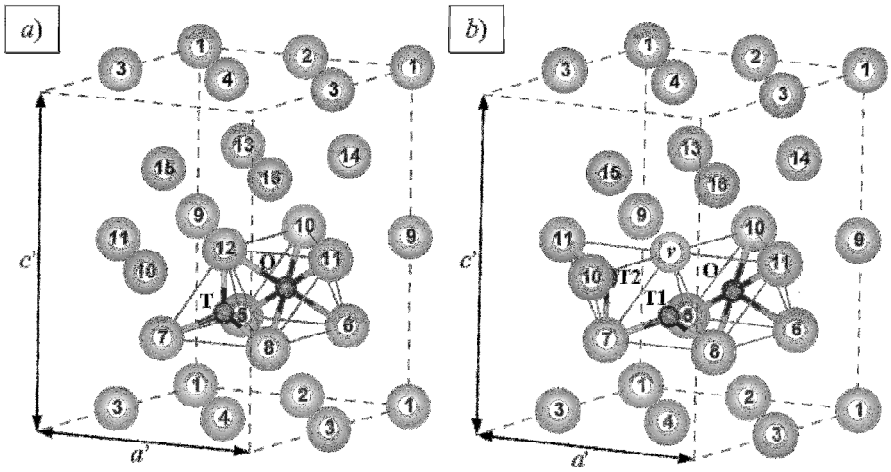


Рис. 1. Расчетные ячейки систем Ti–H (a) и Ti–vac (b), где атомы водорода занимают тетраэдрические (T, T1 и T2) или октаэдрические (O) междоузлия; a' и c' – параметры расчетной ячейки

Результаты и выводы. При тетраэдрической координации водорода параметры решетки титана *a* и *c* увеличиваются, соответственно, на 0,4% и 0,66% по сравнению с чистым металлом, а при октаэдрической – увеличиваются на 0,22% и 0,3% соответственно. Образование вакансии вызывает сокращение объема кристалла, уменьшая параметры *a* и *c*, соответственно, на 0,07 и 2,30 %. В свою очередь, изменение параметров решетки при внедрении водорода в систему титана с вакансией имеет различный вид в зависимости от расположения водорода в междоузлиях: при внедрении водорода в междоузлие T1 оба параметра *a* и *c* увеличиваются на 0,31% и 0,05%, соответственно; в T2 – параметр *a* увеличивается на 0,20%, а параметр *c* уменьшается на 0,08%; в O – параметр *a* уменьшается на 0,17%, а параметр *c* увеличивается на 0,81%; при помещении атома водорода в вакансию – параметр *a* остается неизменным, а параметр *c* уменьшается на 0,84%.

Для оценки структурной устойчивости различных конфигураций системы Ti–H–*vac* рассчитаны энергия растворения водорода в чистом Ti и системе Ti–*vac*:

$$E_H = E(Ti_nH) - E(Ti_{n-1}) - \frac{1}{2}E(H_2), \quad (1)$$

энергия образования вакансии в чистом Ti и системе Ti–H:

$$E_{vac} = E(Ti_{n-1}H) - E(Ti_nH) - \frac{1}{n}E(Ti_n), \quad (2)$$

где $E(Ti_n)$, $E(Ti_{n-1})$, $E(Ti_nH)$ и $E(Ti_{n-1}H)$ – полные энергии, соответственно, чистого α-Ti и систем Ti–*vac*, Ti–H и Ti–H–*vac* с концентрацией вакансий x/N (x и N – количество вакансий и узлов решетки в расчетной ячейке, соответственно), $E(H_2)$– полная энергия молекулы водорода. Результаты расчетов представлены в таблице 1.

Таблица 1

Параметры решетки всех рассмотренных систем, энергия растворения водорода в чистом Ti и системе Ti–vac, энергия образования вакансии в чистом Ti и системе Ti–H

Система	Ti–*vac*	Ti–H^{vac}	Ti–H^{O}–*vac*	Ti–H^{T1}–*vac*	Ti–H^{T2}–*vac*	Ti–H^{O}	Ti–H^{T}
Параметры решетки	a = 2,938 Å c = 4,538 Å	a = 2,939 Å c = 4,499 Å	a = 2,934 Å c = 4,576 Å	a = 2,947 Å c = 4,540 Å	a = 2,944 Å c = 4,534 Å	a = 2,947 Å c = 4,659 Å	a = 2,952 Å c = 4,676 Å
E_H, эВ	–	0,276	-0,650	-0,556	-0,748	-0,574 -0,47 [4]	-0,474 -0,35 [4]
E_{vac}, эВ	2,087 2,03 [4]	–	2,012	2,005	1,813	–	–

Из работы [4] видно, что, рассчитанные в настоящей работе, значения энергии растворения водорода в октаэдрических (-0,47 эВ) и тетраэдрических (-0,35 эВ) междоузлиях, отличаются от результатов работы [4] на 18,12 % и 26,16 %, соответственно, но согласуются с ними качественно. Наличие вакансии в решетке титана приводит к уменьшению энергии растворения водорода в титане. Наименьшее значение энергии растворения E_H (-0,748 эВ) соответствует размещению атома водорода в тетраэдрическом междоузлии Т2 с вакансией в основании соответствующего тетраэдра. То есть в комплексе водород-вакансия в ГПУ решетке титана, атомы водорода энергетически более выгодно занимать положение типа Т2 вблизи вакансий. Из всех рассмотренных случаев, наибольшая энергия растворения (0,276 эВ) водорода в титане с вакансиями наблюдается в случае, когда атом водород размещается в вакансии.

Из таблицы 1 видно, что рассчитанное нами значение энергия образования вакансии в Ti хорошо согласуется с результатами теоретических исследований [4]. Присутствие водорода в титане понижает эту энергию для ближайших к нему атомов металла на величину порядка 0,07–0,27 эВ. Это свидетельствует о том, что водород заметно ослабляет связь между ближайшими к нему атомами металла.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Nelson H. G., Williams D. P., Stein J. E. Environmental hydrogen embrittlement of an α-β titanium alloy: effect of microstructure // Metallurgical Transactions. – 1972. – Vol. 3. – №. 2. – P. 473-479.
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 // Physical review letters. – 1996. – Vol. 77. – №. 18. – P. 3865-3868.
4. Connétable D. et al. First-principles study of diffusion and interactions of vacancies and hydrogen in hcp-titanium // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2011. – Vol. 23. – №. 40. – P. 405401(1)-405401(14).

ОПТИМИЗАЦИЯ ТОЛЩИНЫ ВОДОРОДОНЕПРОНИЦАЕМЫХ ПОКРЫТИЙ НА ОСНОВЕ НИТРИДА ТИТАНА

Фу Сияо

Научный руководитель: ассистент кафедры Общей Физики М.С. Сыртанов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: fuxiyao0526@gmail.com

THE THICKNESS OPTIMIZATION OF HYDROGEN IMPERMEABLE COATING BASED ON TITANIUM NITRIDE.

Fu Xiyao

Scientific Supervisor: assistant of General Physics department M. S. Syrtanov

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin Avenue, 30, 634050

E-mail: fuxiyao0526@gmail.com

Abstract. *In this paper the hydrogen sorption by TiN coated zirconium alloy Zr1%Nb with different thickness was investigated. It was found that hydrogen sorption rate decreases with coating thickness growth, while adhesion increasing. The application of coating based on titanium nitride about 2 microns thick reduces hydrogen sorption rate more than two order.*

Цирконий и сплавы на его основе являются важным конструкционным материалом легководных атомных зонах [1]. Существует проблема защиты конструкционных материалов, работающих в водородосодержащих средах от деструктивного воздействия водорода. Известно, что водород оказывает существенное влияние свойства металлов и сплавов. Проникновение водорода в объём материала приводит к коррозии, охрупчиванию и деградации механических свойств. Эффективным методом защиты циркониевых сплавов от проникновения водорода является нанесение водородонепроницаемых покрытий на основе нитрида титана [2]. Увеличение толщины таких покрытий приводит к росту эффективности барьерных свойств по отношению к водороду, однако существенно ухудшается адгезия. В связи с этим, подбор оптимальной толщины покрытий на основе нитрида титана является актуальной проблемой.

Целью данной работы является оптимизация толщины водородонепроницаемых покрытий на основе нитрида титана.

Приборы, методы исследования. При проведении экспериментов было подготовлено 8 образцов циркониевого сплава Э-110 с линейными размерами 20×20×1 мм. Шлифование осуществлялось с использованием кремневой шлифовальной бумаги. Отжиг осуществляют при 580°С в течение 180 мин. Нанесение покрытий осуществлялось на вакуумной ионно-плазменной установке «Радуга спектр» при различном времени напыления. Время распыления варьировалось от 10 до 100 минут.

Измерение толщины покрытий TiN проводилась на приборе Calotest CAT-S-0000. Calotest CAT-S-0000 - это прибор, в котором реализован способ истирания покрытия с помощью стального шара с

известным радиусом [3]. Процедура истирания продолжается до образования в зоне контакта полусферы. Полученный шаровой сегмент имеет определенную глубину и диаметр основания, по которым и рассчитывается толщина пленки.

Оценка толщины покрытий проводилась по формуле:

$$l = \frac{1}{2}\left(\sqrt{4R^2 - d^2} - \sqrt{4R^2 - D^2}\right)$$

где l – толщина покрытия, R – диаметр шара, D – диаметр большого круга, d – диаметр маленького круга.

Измерение адгезионной прочности проводилось на приборе Micro Scratch Tester фирмы CSEM методом контролируемого нанесения царапины алмазным индентором.

Исследование сорбции водорода проводилось на автоматизированном комплексе Gas Reaction Controller, в котором процесс наводороживания осуществляется из газовой фазы.

Оценка скорость сорбции водорода проводилась по формуле:

$$v = \frac{\Delta c}{\Delta t}$$

где v – скорость сорбции водорода, Δc – изменение содержания водорода, Δt – изменение времени.

Результаты и их обсуждение.

Измеренные толщины покрытий на исследуемых образцах представлены в таблице 1.

Таблица 1

Толщины покрытий TiN на образцах циркониевого сплава Э-110

Время распыления, мин.	10	25	50	100
Толщина, мкм	0,60	0,70	0,92	1,88

Толщины покрытий TiN, нанесенных методом магнетронного распыления увеличивается с ростом времени распыления. Для времени распыления от 10 до 100 минут наблюдается повышение толщины покрытий от 0,60 до 1,88 мкм соответственно.

Для оценки адгезионной стойкости покрытий TiN на циркониевых сплавах Э-110 была измерена адгезионная прочность покрытий. Измеренные адгезионной прочности на исследуемых образцах представлены в таблице 2.

Таблица 2

Адгезионная прочность на образцах циркониевого сплава Э-110

Толщина покрытия, мкм	0,60	0,70	0,92	1,88
Адгезионная прочность, Н	9,45	5,12	4,29	3,70

Из таблицы 2 видно, адгезия покрытий TiN, нанесенных методом магинетронного распыления, уменьшается с ростом толщины покрытия. Для покрытий с толщиной от 0,60 мкм до 1,88 мкм наблюдается уменьшение адгезионной прочности от 9,45 до 3,70 Н соответственно.

Для исследования влияния толщины покрытий нитрида титана на водородопроницаемость были проведены измерения скорости сорбции водорода образцами. Насыщение образцов осуществлялось при температуре 350 ºС, давлении водорода в камере 0,66 атм. Кривые сорбции водорода образцами циркониевого сплава Э-110 в исходном состоянии и с покрытиями нитрида титана различной толщины представлены на рисунке 1.

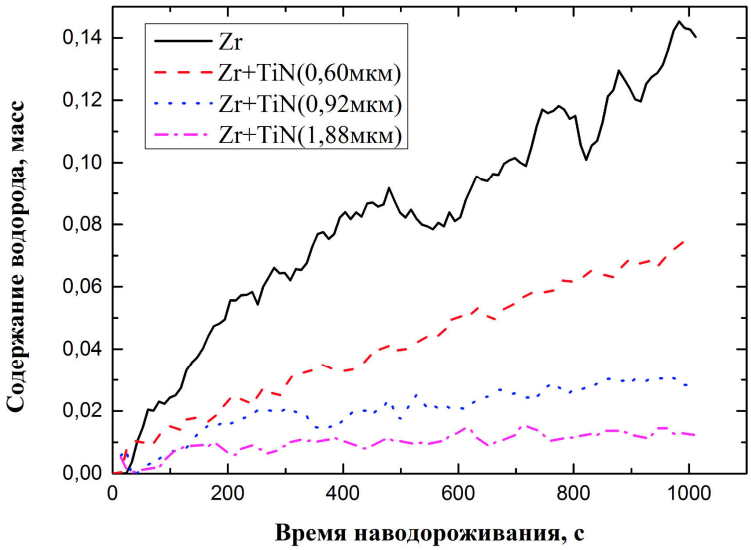


Рисунок 1. Кривые сорбции водорода образцами циркониевого сплава Э-110 в исходном состоянии и с покрытиями нитрида титана различной толщины.

Скорость сорбции водорода образцами циркониевого сплава Э-110 в исходном состоянии составила $1{,}13\times10^{-4}$ *масс/с.* Из рисунка 1 видно, что увеличение толщины покрытия на основе нитрида титана приводит к снижению скорости сорбции. Значение скорости сорбции циркониевого сплава с покрытием нитрида титана толщиной 1,88 мкм составило $6{,}51\times10^{-6}$ *масс/с.* Нанесение покрытия нитрида титана толщиной 1,88 мкм приводит к снижению скорости сорбции циркониевым сплавом Э110 более чем на два порядка.

Выводы. Адгезия покрытий TiN, нанесенных методом магнетронного распыления, уменьшается с ростом толщины покрытия. Для покрытий с толщиной от 0,60 мкм до 1,88 мкм наблюдается уменьшение адгезионной прочности от 9,45 до 3,70 Н соответственно. Скорость сорбции водорода образцами циркониевого сплава Э-110 в исходном состоянии больше, чем образцами циркониевого сплава Э-110 с покрытием на основе нитрида титана. С увеличением толщины покрытия нитрида титана наблюдается снижение водородопроницаемости. Нанесение покрытий нитрида титана толщиной порядка 2 мкм методом магнетронного распыления приводит к снижению скорости сорбции циркониевым сплавом Э110 на два порядка.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Куприн А. С., Белоус В. А., Воеводин В. Н. Высокотемпературное окисление на воздухе оболочек из циркониевых сплавов Э110 и Zr-1Nb с покрытиями. // ISSN 1562-6016. ВАНТ. – 2014. – №1(89). – 126 с.
2. Y. Fukai. The metal-hydrogen system. Basic bulk properties.Series: Springer Series in Materials Science.vols. 21. 2nd rev. and updated ed. 2005, XII, 497 p.
3. N.X. Randall. Finer particle size allows better coating characterisation with the Calotest. Applications bulletin, Dokument AB №5, CSM Instruments, Advanced Mechanical Surface Testing, 1997.

СОЗДАНИЕ МОДЕЛИ ФОТОННОГО ПУЧКА ТЕРАПЕВТИЧЕСКОГО ЛИНЕЙНОГО УСКОРИТЕЛЯ ELEKTA SYNERGY В СИСТЕМЕ ПЛАНИРОВАНИЯ PLUNC

И.Ж. Хасенова, Е.С. Сухих

Научный руководитель: ст. препод., к.ф.-м.н. Е.С. Сухих

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: hasenova-indira@mail.ru

CREATION OF MODEL OF THE PHOTON BEAM WITH A TREATMENT PLANNING SYSTEM PLUNC FOR ELEKTA SYNERGY LINEAR ACCELERATOR

I.Zh. Khassenova, E.S.Sukhikh

Scientific Supervisor: PhD, E.S. Sukhikh

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

E-mail: hasenova-indira@mail.ru

Abstract. *In the present study, we performed a comparison and selection of the most appropriate treatment plan with an educational treatment planning system PLUNC which was provide recommended absorbed dose of ionizing radiation in tumor volume, and the minimum value of the dose in organs at risk and normal tissues surrounding the tumor. For this reason, was created model of the photon beam for ELEKTA Synergy Linear Accelerator.*

The treatment plan was developed for patients with rectal cancer. The simulation was performed on the basis of actual dicom - images of the tumor, which was obtained with modern medical equipment (computed tomography Aquilion Toshiba). For checking of the simulated plan quality, reference dose and dose rate measurements were performed.

Present study demonstrates the relationship between the dose distributions and selected treatment plan. As result of research, was conducted comparison and analysis of algorithms for dose calculation in tissue-equivalent environment with a treatment planning system PLUNC. Was developed methodological guide for work in the PLUNC software. Thereby, educational treatment planning system PLUNC was put into operation.

Введение. Медицинская физика – молодая перспективная наука, находящаяся на стыке двух важнейших научных дисциплин – физики и медицины.

По данным ВОЗ в 2015 году 8,8 миллионов человек умерли от рака, что составляет один из шести случаев смерти во всем мире [1]. На сегодняшний день медицина имеет в своем арсенале широкий спектр физических технологий, программ и оборудований для диагностики и лечения, профилактики и терапии онкологических заболеваний. К их числу относится некоммерческая система планирования PLUNC.

Целью данной работы является введение системы PLUNC в эксплуатацию. Тем самым, была поставлена задача по созданию модели фотонного пучка для терапевтического линейного ускорителя ELEKTA SYNERGY, который на данный момент эксплуатируется в Томском областном онкологическом диспансере. Для реализации поставленной цели была проведена клиническая дозиметрия фотонных

пучков линейного укорителя Elekta Synergy в рамках международных дозиметрических протоколов по клинической дозиметрии TRS-398, TG-51, TG-25 и рекомендаций, прилагаемых к системе PLUNC для создания модели пучка.

Второй целью является разработка методического пособия и внедрение данной работы в программу подготовки магистров по направлению «Ядерная медицина» в Национальном исследовательском Томском политехническом университете (г.Томск).

Актуальность работы заключается в необходимости проведения качественной подготовки клинических медицинских физиков для проведения успешной лучевой терапии в онкологических центрах. Введение некоммерческой системы планирования PLUNC в эксплуатацию и написание методического пособия к ней, позволяет решить данную проблему.

Материалы и методы исследования: выбор наиболее эффективного плана лечения проводился на основе обработки снимков пациента с раковой опухолью прямой кишки, сделанных на мультиспиральном компьютерном томографе TOSHIBA.

Планирование лучевой терапии проводилось в программном продукте PLUNC. Для этого использовался смоделированный фотонный пучок терапевтического линейного ускорителя ELEKTA SYNERGY. Был создан план лечения с геометрией «коробка». Изображение проведенного моделирования представлен на рис. 1.

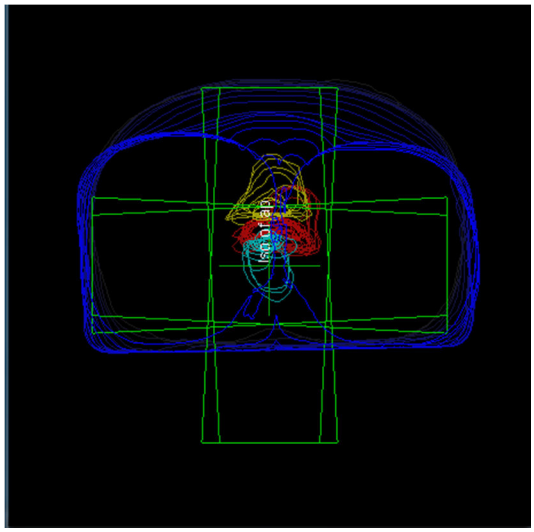


Рис.1. Геометрия пучков фотонов «коробка»

Для проверки качества созданного плана лечения была проведена клиническая дозиметрия фотонных пучков линейного укорителя Elekta Synergy в рамках международных дозиметрических протоколов по клинической дозиметрии TRS-398, TG-51, TG-25 и рекомендаций, прилагаемых к системе PLUNC для создания модели пучка. Для этого были проведены измерения профилей пучков и процентных глубинных дозовых распределений для энергий 6 и 10 МэВ по созданному плану лечения при помощи современной дозиметрической системы для проведения клинической дозиметрии - анализатора дозного поля Blue Phantom (рис. 2).

Результаты. Были построены дозовые профили смоделированных полей (рис. 3) и рассчитаны количественные характеристики смоделированного поля – гладкость и однородность, величины которых

лежат в пределах нормы согласно протоколам по клинической дозиметрии TRS-398 25 и рекомендациям, прилагаемых к системе PLUNC для создания модели пучка.

Рис.2. Проведение клинической дозиметрии

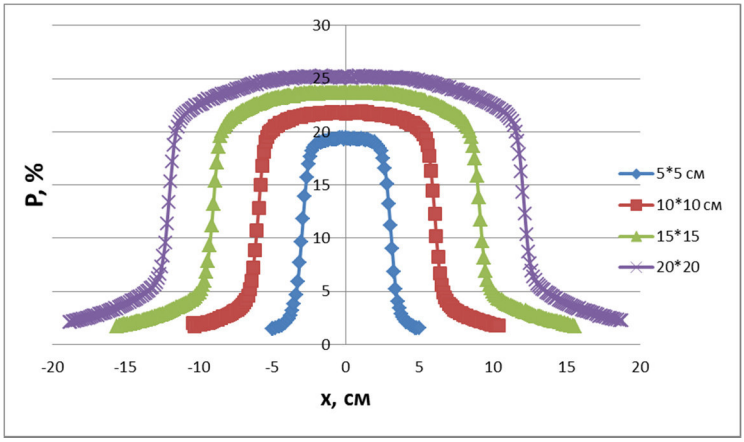


Рис. 3. Дозовый профиль для пучка фотонов с энергией 6 МэВ

Выводы: посредством создания виртуальной модели фотонного пучка линейного укорителя Elekta Synergy в системе планирования PLUNC, а также посредством разработки и внедрения в практику методического пособия для подготовки медицинских физиков по дистанционному планированию лучевой терапии была введена в эксплуатацию система планирования PLUNC. Проведенная клиническая дозиметрия и обработка результатов полученных измерений указывают на целесообразность и эффективность использования данной программы не только в образовательных, но и также в терапевтических целях. В дальнейшем планируется проведение верификации и сравнение полученных результатов с коммерческими системами дозиметрического планирования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Последние данные ВОЗ по раку [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://www.who.int/features/factfiles/cancer/ru/

ВЛИЯНИЕ КАВИТАЦИИ НА ДИСКОВЫЙ ЗАВИХРИТЕЛЬ ДЛЯ ПЕРЕМЕШИВАНИЯ РАСПЛАВЛЕННОГО АЛЮМИНИЯ И ЧАСТИЦ МОДИФИКАТОРА

М.Г. Хмелева, А.Б. Тохметова
Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. Л.Л. Миньков
Национальный исследовательский Томский государственный университет,
Россия, г.Томск, пр. Ленина, 36, 634050
E-mail: khmelmg@gmail.com

CAVITATION INFLUENCE ON DISK AGITATOR FOR MIXING MOLTEN ALUMINIUM AND MODIFIER PARTICLES

M.G. Khmeleva, A.B. Tokhmetova
Scientific Supervisor: Prof., Dr. L.L. Minkov
Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050
E-mail: khmelmg@gmail.com

Abstract. *In this study we assess the conditions in which cavitation occurs while stirring the molten aluminum with the modifier particles by means of disk agitator.*

Введение. К настоящему времени разработаны различные технологии дополнительного легирования и модифицирования промышленных алюминиевых сплавов, которые достигли определенного уровня, и дальнейшая попытка их совершенствовать не позволяет получать требуемый результат [1]. Альтернативным способом (технологией) воздействия на расплавленный металл является специально разработанное перемешивающее устройство [2], которое за счет комплексного воздействия вибрации, механического перемешивания и введения наночастиц модификаторов (оксидов, боридов и т.д.) в расплавленный металл позволяет повысить качество металла. Устройство состоит из дискового завихрителя (рис. 1 а) и источника вращения. Размеры отверстий в дисках подобраны так, чтобы при работе устройства в тигле при температуре расплава 720-780°С расплавленный металл мог проходить через отверстия.

Целью данного исследования является оценка режимов работы перемешивающего устройства [2], при которых в расплавленном алюминии под действием дискового завихрителя возникает гидродинамическая кавитация.

Описание проблемы. На рис. 1 б) показан завихритель после 5 минут работы в промышленном тигле емкостью 100 литров с расплавленным алюминием при температуре 750°С и частоте вращения 2500 об/мин. Как видно из рисунка, все рассекатели отсутствуют. Края дисков «съедены». Учитывая, что температура плавления титана, из которого выполнен завихритель, около 1500°С, температурное воздействие расплавленного алюминия не может являться причиной разрушения завихрителя. К тому же, структура поверхности дискового завихрителя типична для поверхности, испытавшей кавитационное воздействие.

Известно, что кавитация возникает при течении жидкости вокруг плохо обтекаемых тел, когда

статическое давление в жидкости оказывается меньшее парциального давления насыщенных паров и растворенных газов. За условия возникновения гидродинамической кавитации отвечает критерий кавитации, определяемый выражением [1, 3]: $\kappa = \left(P_1 - P_{нп}(T)\right) \Big/ \left(0{,}5\rho V^2\right)$, где ρ – плотность жидкого металла, V – скорость жидкого металла, P_1 – статическое давление; $P_{нп}$ – давление насыщенных паров металла при температуре T.

а) *б)*

Рис. 1. Дисковый завихритель.
а – до действия кавитации; б – после действия кавитации.

Гидродинамическая кавитация возникает в том случае, если значение критерия кавитации меньше единицы. Оценим критерий кавитации для рассматриваемого завихрителя.

Давление насыщенных паров на поверхности раздела фаз жидкость-пар подчиняется закону [4]:

$$P_{нп}(T) = P_1 \cdot \exp\left(\frac{L}{R_y}\left(\frac{1}{T_{кип}} - \frac{1}{T}\right)\right),$$

Результаты исследования. Примем теплоту испарения алюминия L = $2.943 \cdot 10^5$ Дж/(моль), температуру кипения алюминия при нормальных условиях $T_{кип}$ = 2723 К. Здесь универсальная газовая постоянная R_y = 8,31 Дж/(моль·град), атмосферное давление P_1 = 101325 Па. Пусть температура расплавленного алюминия равна 750°С (T = 1023 К), плотность жидкого алюминия – 2700 кг/м^3, внешний радиус диска завихрителя R = 0.04 м. При скорости оборотов мешалки в минуту – n, угловая скорость вращения равна $2\pi n/60$, а окружная скорость края диска равна $2\pi nR/60$. Тогда число оборотов, при котором возникает кавитация, определится неравенством:

$$n > n_{кр}(T,R) = \frac{60}{2\pi R}\sqrt{2\frac{P_1 - P_{нп}(T)}{\rho}}.$$

На рис. 2 показана зависимость критического числа оборотов от температуры расплавленного алюминия. Область, лежащая выше кривой, это область возникновения кавитации, а ниже – отсутствие кавитации. Для радиуса диска 40 мм, скорость вращения выше 2100 об/мин приводит к кавитации при

любых значениях температуры, а для радиуса диска 75 мм таковой является скорость вращения выше 1100 об/мин.

На рис. 3 показана зависимость критического числа оборотов от радиуса диска завихрителя. Область, лежащая выше кривой, соответствует области возникновения кавитации, а ниже – отсутствие кавитации. При изменении температуры алюминия от температуры плавления 660 °С до 2000 °С положение кривой зависимости критического числа оборотов мешалки от радиуса диска изменяется слабо, а при больших температурах – 2200°С и выше смещение этой кривой становится заметным. Из графика видно, что для радиуса диска меньше 26 мм – 27 мм кавитация не будет иметь место при изменении температуры в диапазоне от 660 °С до 2000 °С.

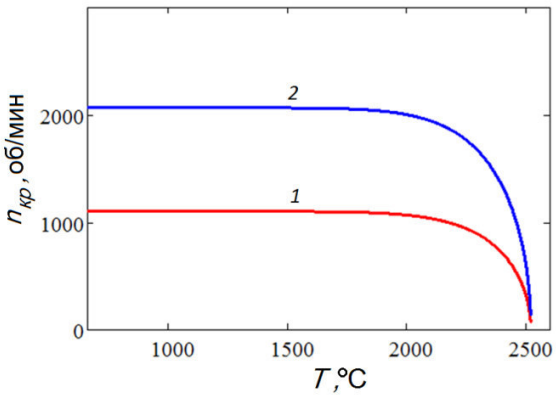


Рис. 2. Зависимость критического числа оборотов от температуры металла.
1 – r = 0,075 м, 2 – r = 0,04 м.

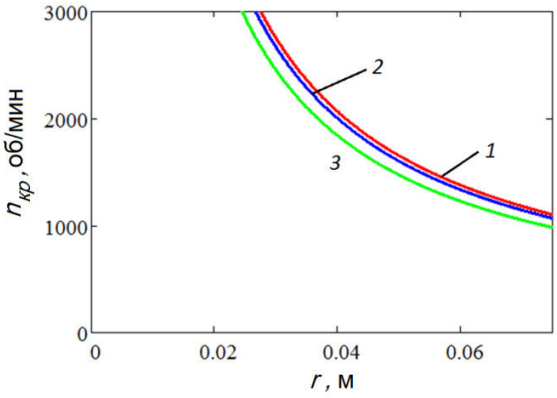


Рис. 3. Зависимость критического числа оборотов от радиуса диска.
1 – T = 660 ℃, 2 – T = 2000 ℃, 3 – T = 2200 ℃,

Выводы. Показано, что причиной разрушения дискового 40 мм завихрителя, вращающегося со скоростью 2500 об/мин, является гидродинамическая кавитация. Увеличение диаметра дискового завихрителя позволяет уменьшить число оборотов источника вращения, при котором возникает кавитация. Поскольку явление кавитации является благоприятным для дегазации расплавленного металла, то для предотвращения кавитационного разрушения завихрителя требуется нанесение на его поверхность специального защитного покрытия.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ефимов В.А., Эльдарханов А.С. Технологии современной металлургии. – М.: Новые технологии, 2004. – 784 с.
2. Ворожцов А.Б., Архипов В.А., Шрагер Э.Р. и др. Устройство для смешения жидкостей и порошков с жидкостью: заявка на патент № 2016130836 РФ. – Заявлено 26.07.2016.
3. Кнэпп Р., Дейли Дж., Хэммит Ф. Кавитация. – М.: Мир, 1974. – 688 с.
4. Справочник химика/ под. ред. Б.П. Никольского. – М.-Л. Химия, 1982. – С. 682–693.

РАСЧЕТ УПРУГИХ СВОЙСТВ PdH МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКЕ

Цзи Вэньян

Научный руководитель: ассистент, к.ф.-м.н. Н.В. Чистякова

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: 634119425@qq.com

MOLECULAR DYNAMIC CALCULATION OF PdH ELASTIC PROPERTIES

Ji WenYang

Scientific Supervisor: Assistant., Dr. N.V. Chistyakova

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

E-mail: 634119425@qq.com

Abstract. *Mechanical properties of metals can change much in the presence of hydrogen. In this work, the mechanical properties - modulus of elasticity and the tensor of elasticity is calculated using molecular dynamics method. This method takes into account the atomic structure of matter. Mechanical properties were determined for PdH structures with different concentrations of hydrogen.*

Введение. Водород существенно влияет на механические свойства металлов. В зависимости от концентрации, водород может приводить как к охрупчиванию, так и к увеличению твердости. Эти свойства можно оценить по величине модуля упругости и коэффициентов тензора упругости. В работе эти параметры определяются с помощью метода молекулярной динамики. Метод молекулярной динамики – метод теоретического изучения вещества на атомном уровне [1-3]. Метод позволяет наблюдать какие изменения в структуре на атомном уровне могут повлиять на механические свойства. Расчеты проводились в программе молекулярной динамики LAMMPS [4].

Для расчета упругих параметров нужно выполнить следующую последовательность действий: построить структуру PdH_x, задать потенциал взаимодействия, рассчитать параметры.

Построение структуры. Палладий имеет гранецентрированную кубическую решетку (ГЦК) с периодом решетки 3,89 А. Водород занимает в этой решетке междоузлия. В ГЦК решетке имеется 2 вида междоузлий – октопоры и тетрапоры. Согласно расчетам [3], октопоры энергетически более выгодны, поэтому они заполняются в первую очередь. С помощь команды (*lattice fcc 3.89*) – строим решетку для палладия. С помощь команды (*lattice fcc 3.89 origin 0 0 0.5*) – строим подрешетку для водорода в октопорах.

Потенциал взаимодействия. Основа метода молекулярной динамики – моделирование движения атомов тела. Атомы движутся, потому что на них действуют силы со стороны соседних атомов. Сила взаимодействия между атомами определяется из потенциала взаимодействия (1). Потенциал взаимодействия – это энергия взаимодействия между атомами, в зависимости от расстояния между ними. В данной работе используются 2 типа потенциалов – потенциал Морзе (2) и потенциал погруженного атома (3), [4]. Параметры потенциала Морзе: для Pd-Pd, $D_0 = 0{,}471$, α=1,7, $r_0 = 2{,}87$; : для $\mathrm{Pd-H}$, $D_0 = 0{,}107$, $\alpha = 0{,}9$, $r_0 = 1{,}27$; : для $\mathrm{H-H}$, $D_0 = 0{,}045$, $\alpha = 1{,}0$, $r_0 = 0{,}7$.

$$F(r) = -\nabla U(r) \qquad (1)$$

$$U(r) = \mathbf{D_0}\left[\mathbf{e}^{-2\propto(\mathbf{r}-\mathbf{r_0})} - \mathbf{2e}^{-2(\mathbf{r}-\mathbf{r_0})}\right] \quad (2)$$

Где, r_0 - равновесное расстояние (расстояние на котором сумма сил, действующих на частицу равно нулю); D_0— энергия связи; α — параметр, характеризующий ширину потенциальной ямы.

$$U_i = F_i(\rho_i) + \frac{1}{2}\sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{N}\varphi_{ij}(r_{ij}), \quad (3)$$

где $\rho_i = \sum_{j\neq i} f_i(r_{ij})$.

Расчет параметров. Модуль упругости является мерой напряжений в кубическом кристалле при однородном сжатии или растяжении со всех сторон. Тензор коэффициентов упругости – это набор коэффициентов пропорциональности между напряжением приложенным к телу, и соответствующей деформацией. (4)

$$\sigma_{ij} = C_{ij}e_{kl} \quad (4)$$

В программе для расчета коэффициентов тензора применяется следующий алгоритм [5]: на каждом шаге производится деформация решетки и напряжений в различных направлениях решетки, которые получились в результате деформации. После нескольких шагов деформации, из зависимости напряжения от величины деформации, определяют компоненты тензора (4). Модуль упругости определяют из компонентов тензора по формуле (5).

$$B = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12}) \quad (5)$$

Результаты расчета. В таблице 1 приведены значения коэффициентов тензора упругости для разных концентраций. На рисунке 1 показана зависимость модуля упругости от концентрации водорода.

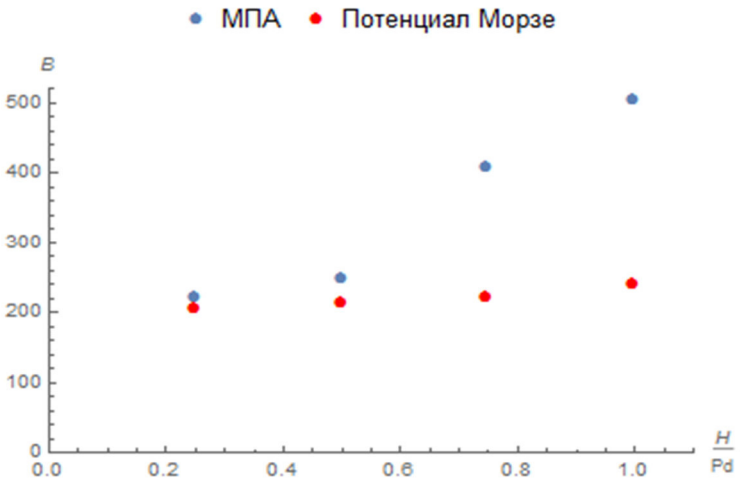


Рис. 1. Зависимость модуля упругости от концентрации водорода

Таблица 1

Значения коэффициентов тензора упругости для разных концентраций

H :Pd (концентрация)	**МПА**	**Потенциал Морзе**
1:1 Число атомов (768:768)	$\begin{pmatrix} 562 & 474 & 474 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 562 & 474 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 562 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 61 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 61 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 61 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 322 & 196 & 196 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 322 & 196 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 322 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 196 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 196 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 196 \end{pmatrix}$
0.75：1 Число атомов (576：768)	$\begin{pmatrix} 431 & 361 & 361 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 431 & 361 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 431 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 57 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 57 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 57 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 299 & 182 & 182 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 299 & 182 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 299 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 182 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 182 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 182 \end{pmatrix}$
0.5：1 Число атомов (384：768)	$\begin{pmatrix} 331 & 269 & 269 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 331 & 276 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 331 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 51 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 51 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 51 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 287 & 175 & 175 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 287 & 175 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 287 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 175 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 175 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 175 \end{pmatrix}$
0.25：1 Число атомов (192:768)	$\begin{pmatrix} 256 & 213 & 213 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 256 & 213 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 256 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 47 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 47 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 47 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 275 & 168 & 168 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 275 & 168 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 275 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 168 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 168 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 168 \end{pmatrix}$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chistyakova, N. and Tran, T.M.H. (2016). A study of the applicability of different types of interatomic potentials to compute elastic properties of metals with molecular dynamics methods.// AIP Conf. Proc. Vol.1772, p.060019.
2. Чистякова Н.В. Моделирование структуры Pd и PdH методом молекулярной динамики // Перспективы развития фундаментальных наук: Труды XII Междунар. конференции студентов и молодых ученых. – Томск, 2015. –С. 308–310.
3. Chistyakova N. (2016) Molecular dynamics simulation of Pd and PdH structure. // Key Engineering materials. Vol 683, pp 583-588
4. Сайт программы LAMMPS [Электронный ресурс] Режим доступа: http://lammps.sandia.gov.
5. Сайт с примером расчета параметров упругости. Режим доступа: http://lammps.sandia.gov/doc/Section_example/html.

ВЛИЯНИЕ ВОДОРОДА НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТИТАНОВОГО СПЛАВА

Цзян Синьмин

Научный руководитель: доцент, к.т.н. Е.Н. Степанова

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: 384390197@qq.com

EFFECT OF HYDROGEN ON THE MECHANICAL PROPERTIES OF TITANIUM ALLOY

Jiang Xinming

Scientific Supervisor: Ass.Prof., PhD E.N. Stepanova

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

E-mail: 384390197@qq.com

***Abstract**. The report examines the effect of hydrogen concentration on the physical properties of titanium alloys. The experimental results show that after hydrogen peroxide treatment, hydrogen can reduce the tensile strength, the higher the hydrogen concentration, the lower the tensile strength.*

Введение. В настоящее время много учёных исследуют титановые сплавы. Этот интерес обусловлен тем, что сплавы титана считаются перспективными материалами для применения в области медицины и аэрокосмической промышленности [1-2]. Одним из ценных свойств титана является биологическая совместимость с живой тканью, поэтому титан и его сплавы станут идеальными материалами в медицинской области [3]. В процессе эксплуатации титановые сплавы подвергаются наводороживанию, в результате чего может развиваться водородная хрупкость даже в том случае, если концентрация водорода не превышает предельно допустимого значения. Поэтому целью данной работы является изучение влияния водорода на механические свойства сплава ВТ6.

Материал и методы исследований. В качестве материала исследования в данной работе был использован двухфазный ($\alpha+\beta$) титановый сплав Ti-6Al-4V марки ВТ6 в мелкозернистом состоянии. Образцы сплава были наводорожены до различных концентраций при температуре 773 К и давлении 2 атм с использованием автоматического комплекса Gas Reaction Controller. Концентрация водорода в образцах сплава после наводороживания была дополнительно измерена с помощью анализатора водорода RHEN 602 с точностью ±0.0001%. Объемные доли и параметры решетки определяли с точностью ±1% и 0.0001 нм, соответственно, методом рентгеноструктурного анализа на дифрактометре Shimadzu XRD-7000 в излучении Cu-K_α. Образцы в виде двойной лопатки были вырезаны из заготовок электроискровым способом. Поверхность образцов подвергали механической шлифовке и электролитической полировке. Механические свойства образцов были исследованы методом одноосного растяжения.

Экспериментальные результаты и их обсуждение.

В качестве материала исследования был использован мелкозернистый (МЗ) титановый сплав ВТ6. В исходном состоянии сплав ВТ6 имеет негомогенную структуру, состоящую из однофазных α и

двухфазных α + β областей. Однофазные α области размерами 10–40 мкм, как правило, окружены двухфазными (α + β) областями.

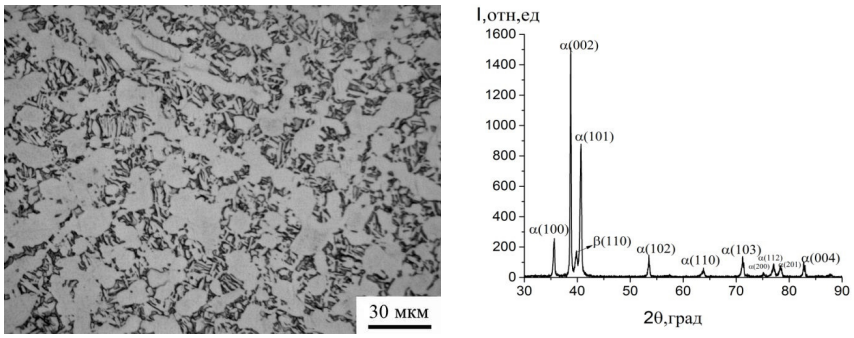


Рис. 1. Микроструктура и участок дифрактограммы образца МЗ сплава ВТ6 в исходном состоянии

Участок типичной дифрактограммы образца сплава ВТ6 в исходном состоянии показан на рис. 1. Из дифрактограммы видно, что в исходном состоянии в сплаве содержатся α фаза с объемной долей 97,8 % и β фаза с объемной долей 2,2 %. Параметры решетки α фазы: a = 0,29263 нм, c = 0,46833 нм, а в β фазе a = 0,31516 нм. В сплаве наблюдается текстура в направлении [002] с коэффициентом Марча-Долласа 0,6741.

Значения концентрации водорода в образцах сплава после наводороживания в течение различного времени, измеренные с помощью анализатора водорода RHEN 602, приведены в таблице 1.

Таблица 1

Значения концентрации водорода в образцах сплава ВТ6

Материал и условия наводороживания	Концентрация водорода, мас. %
Сплав ВТ6 при 500°С, 2 атм, 1400с	0,78067
Сплав ВТ6 при 500°С, 2 атм, 1200с	0,85046
Сплав ВТ6 при 500°С, 2 атм, 5000с	0,097
Сплав ВТ6 при 500°С, 2 атм, 4000с	0,34

На рисунке 2 приведены типичные кривые растяжения образцов сплав ВТ6 с различным содержанием водорода при температуре 293 К. Видно, что в общем случае на указанных кривых наблюдаются три стадии: упрочнения, установившейся деформации и разупрочнения. Длительность стадий по деформации зависит от концентрации водорода в сплаве.

Результаты экспериментальных исследований зависимости механических свойств при растяжении образцов МЗ сплава ВТ6 от концентрации водорода при температуре 293 К приведены в табл. 2. Из данных, представленных видно, что при температуре 293 К значения пределов текучести ($\sigma_{0,2}$) и предела прочности (σ_B) и величина деформации до разрушения уменьшаются с увеличением концентрации водорода в сплаве. При этом увеличение концентрации водорода приводит к уменьшению модуля Юнга.

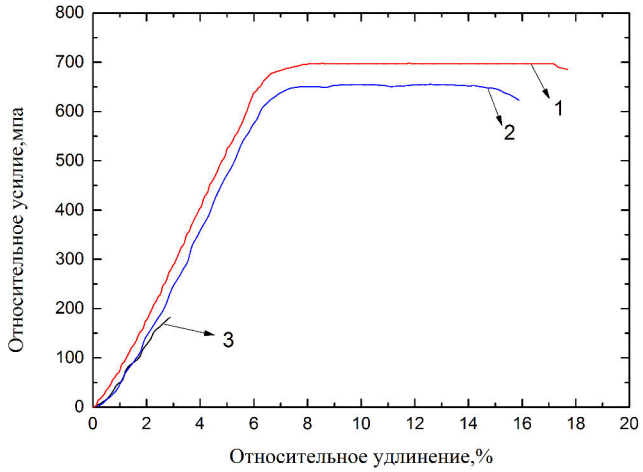


Рис. 2. Кривые растяжения образцов МЗ сплава ВТ6: 1 – образец в исходном состоянии; 2 – образец после насыщения до концентрации 0,06 м.%; 3 – образец после насыщения до концентрации 0,85 м.%

Также из рисунка 2 видно, что при насыщении титанового сплава ВТ6 водородом до концентрации больше, чем 0,34 % образец сплава разрушается хрупко на упругой части кривой растяжения.

Таблица 2

Механические свойства сплава ВТ6 с различным содержанием водорода

Концентрация водорода, %	$\sigma_{0,2}$, МПа	$\sigma_в$, МПа	ε, %	Е, ГПа
0,002	650	697	17.8	110
0,097	650	680	12,2	100
0,06	600	655,5	15,88	96,5
0,11	605	679,5	18,87	92,3
0,15	600	657,25	17,569	92,2

Заключение. При анализе экспериментальных данных было установлено, что водород влияет на механические свойства титановых сплавов. Механические свойства с увеличением концентрации водорода в сплаве ВТ6 уменьшаются. При этом при концентрации больше, чем 0,34 % образец сплава разрушается хрупко на упругой части кривой растяжения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. http://studopedia.ru
2. Александров А.В. Особенности развития современного рынка титана // Труды международной конференции «Ti-2007 в СНГ». – Украина, г. Ялта, 15-18 апреля 2007 г. – Ялта, 2007. – С. 7–10.
3. Long M., Rack H.J. Titanium alloys in total joint replacement – a materials science perspective // Biomaterials. – 1998. – Vol. 19. – P. 1621–1639.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ РАВНОМЕРНОСТИ ТОЛЩИНЫ НИКЕЛЕВЫХ ПОКРЫТИЙ, НАНЕСЕННЫХ НА ЦИРКОНИЕВЫЕ СПЛАВЫ МЕТОДОМ МАГНЕТРОННОГО РАСПЫЛЕНИЯ

Цяо Цзинвэнь

Научный руководитель: ассистент, Е.Б. Кашкаров

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: qiaojingwen1017@gmail.com

DETERMINATION OF THICKNESS UNIFORMITY OF NICKEL COATINGS DEPOSITED ON ZIRCONIUM ALLOYS BY MAGNETRON SPUTTERING

Qiaojingwen

Scientific Supervisor: assistant,E.B. Kashkarov

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin Avenue, 30, 634050

E-mail: qiaojingwen1017@gmail.com

Abstract. *In this paper, the results of measurements of nickel coating thickness are presented. Ni coatings were deposited onto zirconium alloy Zr-1Nb and Si wafers by magnetron sputtering. The thickness of Ni coatings was measured by scanning electron microscopy (SEM), ball abrasion method and the developed non-destructive XRD method.*

Введение.Многочисленные исследования влияния водорода на свойства циркониевых сплавов требуют подготовки экспериментальных образцов, содержащих различные концентрации водорода, причем с различным распределением водорода в объеме материала. Предварительная ионная очистка и нанесение слоя никеля на циркониевые сплавы позволяет увеличить скорость сорбции водорода. Важным этапом исследования экспериментальных образцов является определение толщины нанесенных покрытий. При этом представляет интерес разработка методов неразрушающего контроля толщины покрытий. К наиболее перспективным методам неразрушающего контроля можно отнести метод рентгеновской дифракции. Неразрушающий метод необходим для непосредственного контроля равномерности нанесения никелевых покрытий перед проведением последующих экспериментов, что невозможно при применении разрушающих методов.

Целью данной работы является разработка методики неразрушающего контроля равномерности толщины никелевых покрытий, нанесенных на циркониевые сплавы методом магнетронного распыления.

Материалы и методы

Для проведения экспериментов были использованы образцы кремния и циркониевого сплава Zr-1Nb размером 20×20×1 мм. Формирование никелевых покрытий осуществлялось методом магнетронного распыления при параметрах, представленных в таблице 1.

Таблица 1.

Режим осаждения никелевых покрытий

Мощность разряда, кВт	Ток разряда, А	Давление в камере (аргон), Па	Время напыления, мин
2	3,5	0,15	5-20

Неразрушающий контроль толщины покрытий проводился методом рентгеновской дифракции в геометрии скользящего пучка, при этом толщина покрытий рассчитывалась по соотношению:

$$h = \frac{\ln(1-R)\sin\alpha\sin(2\theta-\alpha)}{\mu(\sin\alpha+\sin(2\theta-\alpha)} \quad (1)$$

где α – угол падения, θ – угол скольжения (брэгговский угол), μ – коэффициент линейного поглощения, R – доля излучения, отраженного слоем с толщиной h.

Результаты и их обсуждение

После формирования никелевых покрытий проводилось измерение их толщины прямыми методами измерения: методом шарового истирания и методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) боковой поверхности скола покрытия. Измерения толщины покрытий проводились в пяти точках на поверхности образцов, как показано на рисунке 1а. Изображения поверхности Si и сплава Zr–1Nb с никелевым покрытием, осажденным в течение 10 минут, представлены на рисунке 1б и 1в. Толщина покрытия в данном случае составила (1,1±0,1) мкм и отличается незначительно на подложках Si и Zr-1Nb.

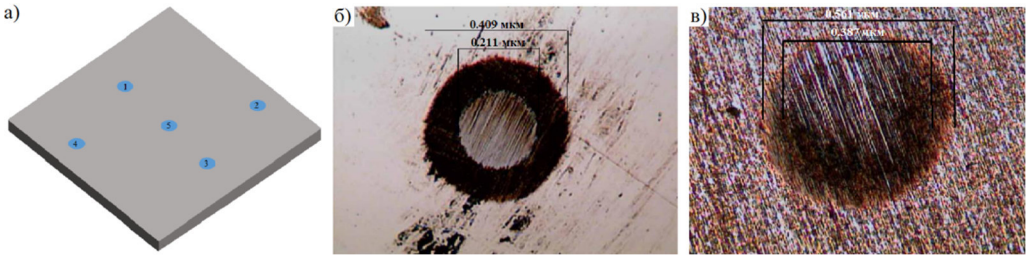


Рисунок 1. Схема измерения толщины покрытий (а) и изображения сферического шлифа на образцах Si (б) и Zr-1Nb (в) с никелевым покрытием

Измерение толщины никелевых покрытий также проводилось методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ). Изображения сколов образцов Si с никелевыми покрытиями, представлены на рисунке 2. Толщина никелевого покрытия изменяется незначительно (±3%) по всей длине скола и составляет 550, 1050 и 1500 нм при 5, 10 и 15 мин. осаждения, соответственно.

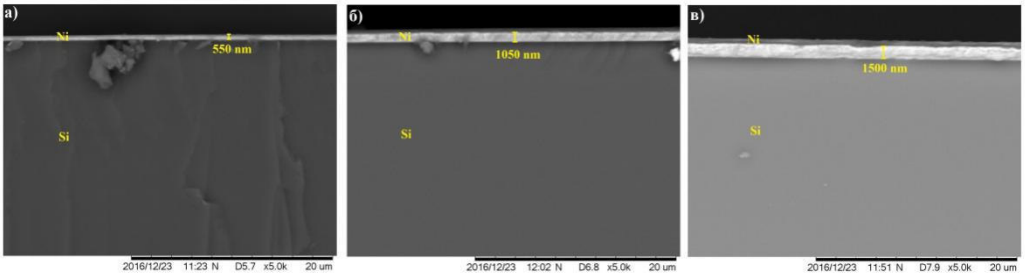


Рисунок 2. СЭМ изображения сколов покрытий Ni на подложке из кремния, нанесенных в течение 5 мин. (а), 10 мин. (б) и 15 (в) мин.

Дифрактограммы покрытия, осажденного в течение 10 мин., на кремниевой подложке в зависимости от угла падения рентгеновских лучей, представлены на рисунке 3. С уменьшением угла падения рентгеновских лучей уменьшается интенсивность рефлекса Si (подложки), причем при значении угла 2° данный рефлекс не наблюдается. При определении толщины никелевого покрытия по формуле (1) величина R имела значение 0,95 и величина μ имела значение 72×10^3 мкм$^{-1}$. Рассчитанное значение толщины покрытия составляет 1,1 мкм.

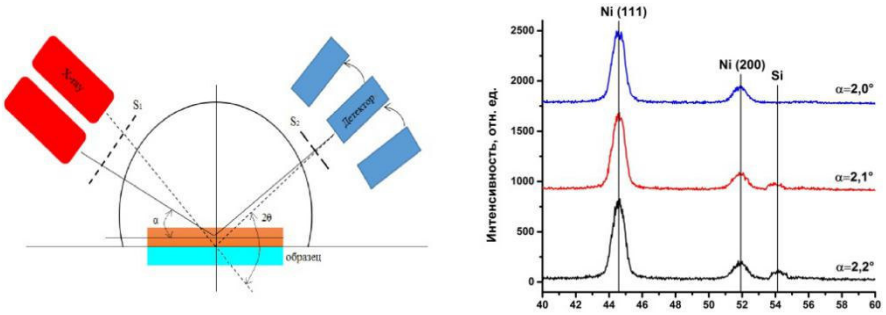


Рисунок 3. Схема измерения (а) и дифрактограммы образца Si (б) с покрытием Ni (10 мин.) при различных углах падения рентгеновских лучей

Выводы. Нанесены никелевые покрытия на подложки из кремния и циркониевого сплава Zr-1Nb методом магнетронного распыления. Измерена толщина никелевых покрытий методом шарового истирания, сканирующей электронной микроскопии и рентгеновским методом в геометрии скользящего пучка. Выявлена линейная зависимость толщины никелевых покрытий в зависимости от времени осаждения в диапазоне 5-20 мин. Разработана методика неразрушающего контроля равномерности толщины никелевых покрытий методом рентгеновской дифракции.

СИНТЕЗ ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ-НАКОПИТЕЛЕЙ ВОДОРОДА НА ОСНОВЕ TI-CR В ПЛАЗМЕ АНОМАЛЬНОГО ТЛЕЮЩЕГО РАЗРЯДА

Чан Ван Туан, Т.Л. Мурашкина

Научный руководитель: ассистент,Т.Л. Мурашкина

Томский политехнический университет, Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: tuanmanu1993@gmail.com

SYNTHESIS OF INTERMETALLIC HYDROGEN STORAGE MATERIALS BASED ON TI-CR BY GLOW DISCHARGE PLASMA

Tran Van Tuan, T.L. Murashkina

Scientific Supervisor: assistant, T.L. Murashkina

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

E-mail: tuanmanu1993@gmail.com

Abstract. *The $TiCr_2$ intermetallic compound with the C36 hexagonal Laves phase has been synthesized by glow discharge plasma. The hydrogen absorption-desorption properties of the obtained alloy were investigated. It is shown that hydrogen storage capacity of material was 0.43 wt % at 85 °C and 8 atm.*

Введение. В настоящее время очевидными актуальными проблемами человечества являются истощение запасов углеродного топлива и загрязнение окружающей среды при их использовании. В связи с этим интерес к водороду как к альтернативному источнику энергии интенсивно растет из года в год. Однако остается нерешенной задача разработки эффективной и безопасной системы хранения и транспортировки водорода. Перспективным считают металлогидридный метод хранения водорода, т.е. хранение водорода в гидридах металлов или интерметаллических соединений (ИМС). Среди этих материалов, особое внимание исследователей уделяется ИМС со структурой фаз Лавеса на основе $TiCr_2$ [1-3]. В данной работе показано, что перспективным методом получения интерметаллических материалов, в частности ИМС $TiCr_2$ может являться плавление в плазме аномального тлеющего разряда.

Материалы и методы исследования. В качестве исходных материалов использовали металлические порошки титана (чистота 99%) и хрома (чистота 99,8%). Процесс получения смеси порошков исходных металлов проводили в высокоэнергетической шаровой мельнице SamplePrep 8000M-230 Mixer/Mill. Плавление смеси порошков осуществляли в плазме аномального тлеющего разряда с помощью установки «КВО» в атмосфере аргона (остаточное давление 5×10^{-4} Па). Рентгеноструктурный анализ полученного сплава проводили с помощью рентгеновского дифрактометра Shimadzu XRD-7000S.

Изучение кинетики сорбции и циклической стабильности при гидрировании/дегидрировании проводились на установке Gas Reaction Controller LP. На первом этапе образец массой около 0,5 г. выдерживали в течение 30 минут в атмосфере водорода под давлением 2 атм., после чего давление водорода поэтапно уменьшалось до 0,05 атм. На втором этапе было проведено 4 цикла сорбции-десорбции в режиме Pressure-Composition Isotherms (PCI) при давлении 8 атм. по 30 минут каждый этап. Все процессы гидрирования проводились при температуре 85 °C.

Результаты исследования. На рисунке 1 представлены результаты рентгенофазового анализа сплава, полученного в плазме аномального тлеющего разряда. Фазовый анализ сплава показал наличие

гексагональной фазы $TiCr_2$ с параметрами решетки a=4.928 Å и c=15.983 Å, соответствующей фазе Лавеса структурного типа C36. Объемное содержание данной фазы составляет 100 %, примеси не обнаружены. Это говорит о том, что плавление в плазме аномального тлеющего разряда является перспективным методом получения ИМС однофазного состава.

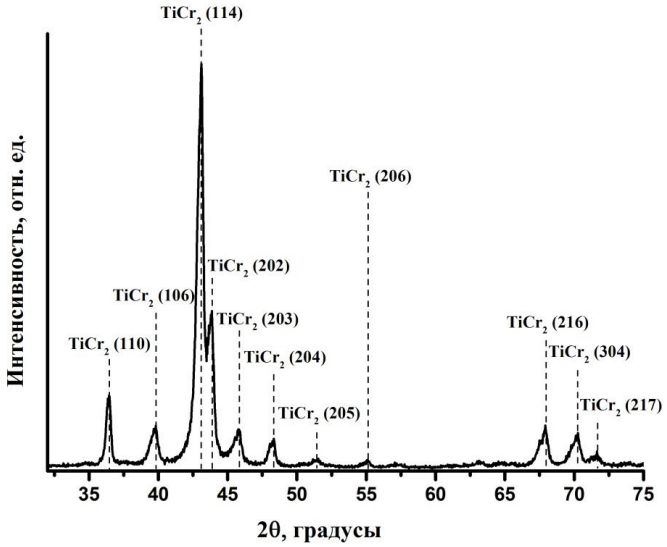


Рис. 1. Дифрактограмма сплава $TiCr_2$, полученного в плазме аномального тлеющего разряда

На рисунке 2 представлены зависимости концентрации водорода от времени при выдержке в атмосфере водорода с давлением 2 атм. и поэтапном вакуумировании до давления 0,05 атм., в результате чего происходил развал литого образца $TiCr_2$. При температуре 85 °C и давлении 2 атм. образец насытился водородом до 0,36 масс.%, а после откачки концентрация водорода в нем осталась 0,25 масс.%, при чем интенсивная сорбция и десорбция осуществляются за первые 5 минут, что говорит о быстрой кинетики взаимодействия с водородом.

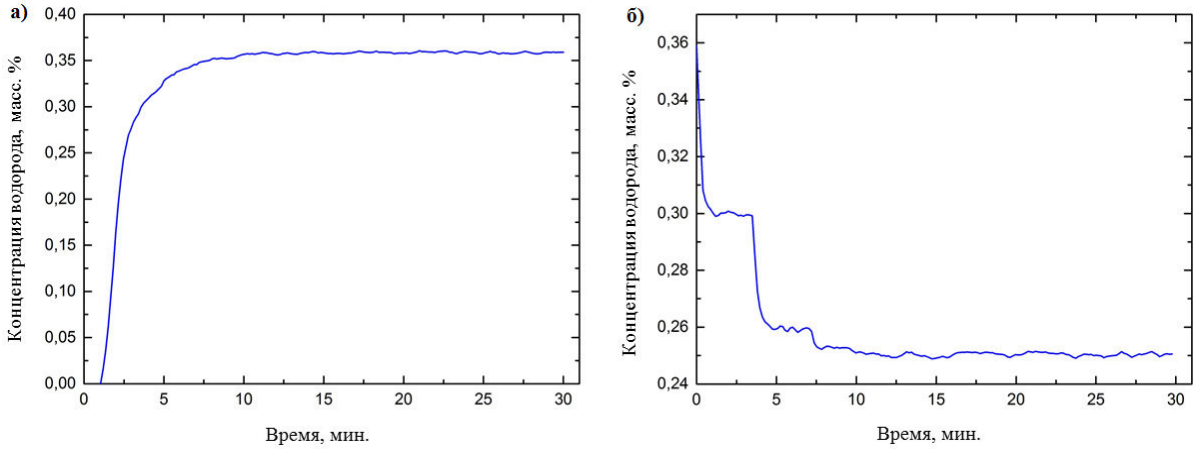


Рис. 2. Зависимость концентрации водорода в сплаве $TiCr_2$ при выдержке в атмосфере водорода (а) и вакуумировании (б)

На рисунке 3 представлены результаты циклической стабильности при гидрировании / дегидрировании при температуре 85 °C. Водородосорбционная емкость сплава после 4-х циклов практически не меняется, но концентрация водорода, оставщаяся в образце после каждого последующего цикла увеличивается, что приводит к уменьшению эффективной емкости. Данные концентрации водорода на каждом этапе приведены в таблице 3.

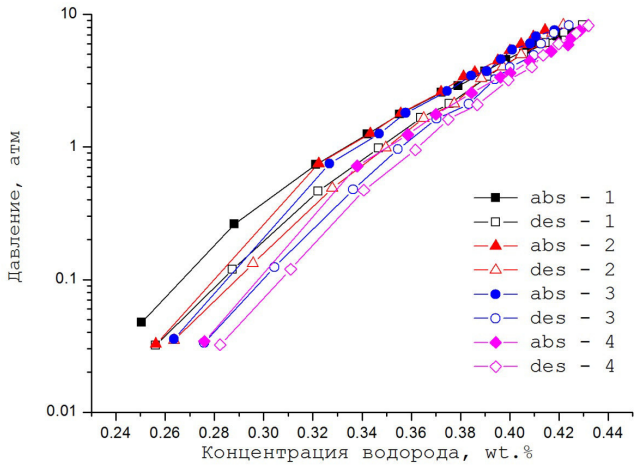


Рис. 3. PCI-кривые гидрирования/дегидрирования $TiCr_2$ (C36)

Таблица 1

Концентрация водорода в ИМС $TiCr_2$ после каждого этапа гидрирования/дегидрирования

№ цикла	В начале цикла, масс.%	После сорбции, масс.%	После десорбции, масс.%	$C_{эфф.}$, масс.%
1	0,25	0,43	0,26	0,17
2	0,25	0,42	0,26	0,16
3	0,26	0,42	0,28	0,14
4	0,28	0,43	0,28	0,15

Падение эффективной емкости может быть обусловлено тем, что при циклировании происходит накопление различного рода дефектов, являющихся ловушками для водорода. Находясь в ловушках, атомы водорода имеют более низую потенциальную энергию, чем в обчных междоузлиях [4]. А также может быть связано с частичным формированием стабильной гидридной фазы, в частности TiH_2 [5].

Заключение. В данной работе методом плавления в плазме аномального тлеющего разряда было получено ИМС $TiCr_2$ со структурным типом фазы Лавеса C36. Полученный сплав не содержит примеси, что говорит о перспективе применения данного метода для получения интерметаллических материалов-накопителей водорода. При температуре 85 °C и давлении водорода 8 атм. материал способен накапливать водород до 0,43 масс. %, причем при циклировании происходит падение эффективной емкости от 0,17 масс. % до 0,15 масс.%.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Skryabina N.E. et al. Correlation between the Hydrogen Absorption Properties and the Vanadium Concentration of Ti-V–Cr Based Alloys // Solid State Phenomena. – 2017. – V. 257. – p. 165-172.
2. Sato R., Tajima I., Nakagawa T., Uchida H. Kinetics of hydrogen absorption by $TiCr_2$ and Ti–Cr based alloys at low temperatures // Journal of Alloys and Compounds. – 2013. – V. 580. – p. s21-s24.
3. Zotov T.A., Sivov R.B., Movlaev E.A., Mitrokhin S.V., Verbetsky V.N. IMC hydrides with high hydrogen dissociation pressure // Journal of Alloys and Compounds. – 2011. – V. 509. – p. s839-s843.
4. Sarahan M. C. et al. Statistical Analysis of Point Defects in Hydrogen Storage Materials //Microscopy and Microanalysis. – 2009. – Vol. 15. – №. S2. – P. 462-463
5. Lin H.C. et al. Cyclic hydrogen absorption–desorption characteristics of TiCrV and Ti0.8Cr1.2V alloys // International Journal of Hydrogen Energy. – 2007. – V. 32. – p. 4966-4972.

РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМА И СОЗДАНИЕ ПАКЕТА ПРОГРАММ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ МОЛЕКУЛЫ ТИПА СФЕРИЧЕСКОГО ВОЛЧКА: ОПРЕДЕЛЕНИЕ НЕПРИВОДИМЫХ ВРАЩАТЕЛЬНЫХ ОПЕРАТОРОВ

Чан СюаньХао

Научные руководители: д.ф.-м.н., профессор Е.С. Бехтерева, д.ф.-м.н., профессор О.Н.Улеников

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: 574969181@qq.com

ANALYTICAL COMPUTER CALCULATIONS FOR HIGH RESOLUTION STUDY OF SPHERICAL TOP MOLECULES SPECTRA

Chang Xuanhao

Scientific Supervisors: Prof. E.S. Bekhtereva, Prof. O.N. Ulenikov

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

E-mail: 574969181@qq.com

***Abstract**. Theoretical analysis of high-resolution spectra of spherical top molecules needs in knowledge of high order and rank rotational operators. Set of high rank (K<=8) rotational operators of the SO(3) symmetry group were developed on the basis of the irreducible tensorial sets theory and of the analytical programming package "Mathematica". Obtained operators were reduced to the Td group for the effective Hamiltonian implementation.*

Введение. Одной из актуальных задач современной молекулярной спектроскопии является исследование фундаментальных свойств многоатомных молекул, обладающих высокой степенью симметрии (CH_4, SiH_4, GeH_4) [11, 12], т.к. такие молекулы имеют многочисленные приложения в различных как чисто академических, так и прикладных задачах астрофизики, планетологии, атмосферной оптики, термохимии, производства полупроводников, астрофизики, планетологии и др. При этом важным является не только экспериментальное исследование спектров, но также и их теоретический анализ, позволяющий извлекать из спектров физическую информацию. Исследование экспериментальных спектров молекул высокой симметрии невозможно без соответствующих математических моделей, поскольку эти молекулы обладают рядом особенностей, в силу которых обычные методы анализа становятся не применимы.

Структура колебательно-вращательных спектров молекулы прямо зависит от ее симметрии, поэтому становится очевидной важность изучения свойств симметрии молекулы [1, 3, 4, 6]. С теоретической точки зрения, молекулы высокой симметрии занимают особое место, так как высокая симметрия, с одной стороны, сильно упрощает процедуру теоретического анализа. Наличие высокой симметрии позволяет легко исследовать спектры в первом приближении. С другой стороны, высокая симметрия проводит к сложным проблемам при интерпретации спектров, основной сложностью является неприменимость метода комбинационных разностей. Для получения высокоточной информации возникает необходимость в рассмотрении так называемых тетраэдрических расщеплений, которые

тривиальными формулами не описываются [10, 11]. Наиболее важная задача, при этом, заключается в решении уравнения Шредингера и построении необходимого для этого эффективного гамильтониана[14]. Причём, эффективный гамильтониан может содержать большие степени **Ω** вращательных операторов J_α, которые до сих пор пока еще не до конца изучены. Для решения этих проблем оказывается необходимо знание теории углового момента [2, 5, 7, 8], а также формализма неприводимых тензорных операторов (НТО), развитого Вигнером в 1958 году [6]. Более того, для определения приведения группы SO(3) на точечную группу, оказывается необходимо так называемая *G*-матрица редукции, которые впервые даётся в аналитическом виде для точечной группы T_d автором [9, 13] в 1995 году.

Метод исследования. В данной работе использована теория неприводимых тензорных операторов, были впервые построены в аналитическом виде вращательные операторы высокого ранга K=Ω=8, а также необходимые для решения вращательных задач приведённые вращательные операторы симметрии T_d. Для реализации задачи была использована квантовая алгебра в виде пакетов программ "Wolfram Mathematica" и блок "quantum".

Результат. Полученный в итоге результат имеет довольный громоздкий вид, поэтому здесь мы в качестве иллюстрации приводим лишь пару из полученных неприводимых тензорных операторов на группе SO(3) и точечной группе T_d.

$$R_1^{8(8)} = \frac{1}{4\sqrt{1430}}(372[J_0,J_+]_+ + 854J^2[J_0,J_+]_+ - 315J^4[J_0,J_+]_+ + 35J^6[J_0,J_+]_+ - 2696[J_0^3,J_+]_+ + 1925J^2[J_0^3,J_+]_+ - 385J^4[J_0^3,J_+]_+ - 2002[J_0^5,J_+]_+ + 1001J^2[J_0^5,J_+]_+ - 715[J_0^7,J_+]_+)$$

$$\begin{aligned}R_y^{8(8,8F_{1y})} = &-\frac{93}{64}J_0\cdot J_- - \frac{427}{128}J^2J_0\cdot J_- + \frac{315}{256}J^4J_0\cdot J_- - \frac{35}{256}J^6J_0\cdot J_- + \frac{2695}{256}J_0^3\cdot J_- - \frac{1925}{256}J^2J_0^3\cdot J_- + \frac{385}{256}J^4J_0^3\cdot J_- \\ &+ \frac{1001}{128}J_0^5\cdot J_- - \frac{1001}{256}J^2J_0^5\cdot J_- + \frac{715}{256}J_0^7\cdot J_- - \frac{399}{2}J_0\cdot J_-^3 - 7J^2J_0\cdot J_-^3 - \frac{21}{128}J^4J_0\cdot J_-^3 + \frac{4641}{128}J_0^3\cdot J_-^3 \\ &+ \frac{91}{64}J^2J_0^3\cdot J_-^3 - \frac{273}{128}J_0^5\cdot J_-^3 - \frac{581}{64}J_0\cdot J_-^5 - \frac{7}{64}J^2J_0\cdot J_-^5 + \frac{35}{64}J_0^3\cdot J_-^5 - \frac{1}{32}J_0\cdot J_-^7 - \frac{93J_0\cdot J_+}{64} - \frac{427}{128}J^2J_0 \\ &\cdot J_+ + \frac{315}{256}J^4J_0\cdot J_+ - \frac{35}{256}J^6J_0\cdot J_+ + \frac{2695}{256}J_0^3\cdot J_+ - \frac{1925}{256}J^2J_0^3\cdot J_+ + \frac{385}{256}J^4J_0^3\cdot J_+ + \frac{1001}{128}J_0^5\cdot J_+ \\ &- \frac{1001}{256}J^2J_0^5\cdot J_+ + \frac{715}{256}J_0^7\cdot J_+ - \frac{399}{2}J_0\cdot J_+^3 - 7J^2J_0\cdot J_+^3 - \frac{21}{128}J^4J_0\cdot J_+^3 + \frac{4641}{128}J_0^3\cdot J_+^3 + \frac{91}{64}J^2J_0^3\cdot J_+^3 \\ &- \frac{273}{128}J_0^5\cdot J_+^3 - \frac{581}{64}J_0\cdot J_+^5 - \frac{7}{64}J^2J_0\cdot J_+^5 + \frac{35}{64}J_0^3\cdot J_+^5 - \frac{1}{32}J_0\cdot J_+^7 - \frac{93J_-\cdot J_0}{64} - \frac{427}{128}J^2J_-\cdot J_0 + \frac{315}{256}J^4J_- \\ &\cdot J_0 - \frac{35}{256}J^6J_-\cdot J_0 - \frac{399}{2}J_-^3\cdot J_0 - 7J^2J_-^3\cdot J_0 - \frac{21}{128}J^4J_-^3\cdot J_0 - \frac{581}{64}J_-^5\cdot J_0 - \frac{7}{64}J^2J_-^5\cdot J_0 - \frac{1}{32}J_-^7\cdot J_0 \\ &- \frac{93J_+\cdot J_0}{64} - \frac{427}{128}J^2J_+\cdot J_0 + \frac{315}{256}J^4J_+\cdot J_0 - \frac{35}{256}J^6J_+\cdot J_0 - \frac{399}{2}J_+^3\cdot J_0 - 7J^2J_+^3\cdot J_0 - \frac{21}{128}J^4J_+^3\cdot J_0 \\ &- \frac{581}{64}J_+^5\cdot J_0 - \frac{7}{64}J^2J_+^5\cdot J_0 - \frac{1}{32}J_+^7\cdot J_0 + \frac{2695}{256}J_-\cdot J_0^3 - \frac{1925}{256}J^2J_-\cdot J_0^3 + \frac{385}{256}J^4J_-\cdot J_0^3 + \frac{4641}{128}J_-^3\cdot J_0^3 \\ &+ \frac{91}{64}J^2J_-^3\cdot J_0^3 + \frac{35}{64}J_-^5\cdot J_0^3 + \frac{2695}{256}J_+\cdot J_0^3 - \frac{1925}{256}J^2J_+\cdot J_0^3 + \frac{385}{256}J^4J_+\cdot J_0^3 + \frac{4641}{128}J_+^3\cdot J_0^3 + \frac{91}{64}J^2J_+^3\cdot J_0^3 \\ &+ \frac{35}{64}J_+^5\cdot J_0^3 + \frac{1001}{128}J_-\cdot J_0^5 - \frac{1001}{256}J^2J_-\cdot J_0^5 - \frac{273}{128}J_-^3\cdot J_0^5 + \frac{1001}{128}J_+\cdot J_0^5 - \frac{1001}{256}J^2J_+\cdot J_0^5 - \frac{273}{128}J_+^3\cdot J_0^5 \\ &+ \frac{715}{256}J_-\cdot J_0^7 + \frac{715}{256}J_+\cdot J_0^7\end{aligned}$$

Полученные результаты используются при разработке программы SPHETOM реализуемой на языке FORTRAN, с помощью которой будет выполняться анализ спектров высокого разрешения молекул типа сферического волчка.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Макушкин Ю. С., Улеников О. Н., Чеглоков А. Е. Симметрия и её применения к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул. – Томск: Изд-во Том. ун-та, 1990. – 221с.
2. Варшалович Д. А., Москалев А. Н., Херсонский В. К. Квантовая теория углового момента. Изд-во наука, Ленингр. отд., Л., 1975, 1–439.
3. Любарский Г. Я. Теория групп и ее применение в физике. Уч.-изд. Л., 1958, – 355с.
4. Bunker P. R. Molecular Symmetry and Spectroscopy. Academic Press, New York, 1979.
5. Wigner E.P. Quantum Theory of Angular Momentum. Academic Press, New York, 1965.
6. Wigner E.P. Group theory and its application to the quantum mechanics of atomic spectra. Academic press, New York, 1959, pages 443.
7. Edmonds A. D. Angular Momentum in Quantum Mechanics. Princeton: Princeton University Press, 1957. Ch. 4, pages 53-62.
8. Ka X.L. Advanced Quantum Mechanics. Higher Education Press, Beijing, 2001, pages 523. (In Chinese)
9. Cheglokov A. E., Ulenikov O. N. On Determination of the Analytical Formulas for Reduction Matrices of Tetrahedral-Symmetry Molecules. // J. Mol. Spectrosc. – 1985. – V.110. – Pages 53-64.
10. Ulenikov O. N., Malikova A. B., Alanko S., Koivusaari M., Anttila R.. High-Resolution Study of the 2ν5 Hybrid Band of the CHD3 Molecule. // J. Mol. Spectrosc. – 1996. – V.179. – Pages 175-194.
11. Ulenikov O. N., Bekhtereva E. S., Albert S., Bauerecker S., Niederer H. M., Quack M.. Survey of the high-resolution infrared spectrum of methane ($^{12}CH_4$ and $^{13}CH_4$): Partial vibrational assignment extended towards 12000 cm^{-1}.//Journal of Chemical Physics. –2014. Vol. 141, – 234302_1 - 234302_33.
12. Ulenikov O.N.,Gromova O.V.,Bekhtereva E.S.,Raspopov N.I.,Sennikov P.G., Koshelev M.A.,Velmuzhova I.A., Velmuzhov A.P.,Bulanov A.D. High resolution study of $^{M}GeH_4$ (M=76.74) in the dyad region. // Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer. –2014. Vol.144, –Pages 11-26.
13. Cheglokov A. E., Saveliev V. N., Ulenikov O. N.. Analytical representation of the values describing the spectra of Td symmetry molecules and crystals// J. Phys B: At, Mol. Phys. –1986. 19, –Pages 3687-3693.
14. Makushkin Yu. S., Ulenikov O. N.. On the Transformation of the Complete Electron-Nuclear Hamitonian of a Polyatomic Molecule to the Intramolecular Coordinates// Journal of molecular spectroscopy. –1977. 68, – Pages 1-20.
15. Y. Y. Kwan. The Interacting States of An Asymmetric Top Molecule XY_2 of the Group C_{2v}, Application to Five Interacting States (101), (021), (120), (200), and (002) of $H_2{}^{18}O$ // J. Mol. Spectrosc. –1978. 71, -Pages 260-280.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ДИФФУЗИИ ВОДОРОДА В ПАЛЛАДИИ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Чан Тхи Ми Хуэ

Научный руководитель: ассистент, к.ф.-м.н. Н.В. Чистякова

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: myhuesp2@gmail.com

MOLECULAR DYNAMICS SYMULATION OF HYDROGEN DIFFUSION IN PALLADIUM

Tran Thi My Hue

Scientific Supervisor: assistant of General Physics Department, Dr. N.V. Chistyakova

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

E-mail: myhuesp2@gmail.com

***Abstract**. In the present work, the diffusion of hydrogen atoms in the crystal lattice of palladium was investigated using the molecular dynamics. The diffusion coefficients, activation energies and preexponential factors were determined for structures with different hydrogen concentration. It is determined that the diffusion coefficients decrease and the activation energy of diffusion grows with increasing concentrations of hydrogen.*

Введение. Диффузионные процессы играют чрезвычайно важную роль как в природных, так и в технологических процессах. Моделирование – это способ подтверждения или опровержения теоретических предположений о механизмах протекания реакций. Компьютерное моделирование дает возможность учитывать и контролировать все параметры, влияющие на процесс диффузии. В настоящее время, большое число исследований, использующих компьютерное моделирование, проводится с помощью метода молекулярной динамики [1-6]. Преимущество этого метода в том, что молекулярно-динамическая модель учитывает структуру вещества на атомном уровне. В методе молекулярной динамики модель строится с использованием классической механики Ньютона и сама может определять какие процессы происходят в системе. Целью настоящей работы является моделирование зависимости диффузионных параметров от концентрации водорода в системе «палладий – водород» методом молекулярной динамики.

Метод молекулярной динамики. В методе молекулярной динамики (ММД) моделирование приводится на основе расчета эволюции системы взаимодействующих частиц путем интегрирования уравнений их движения, заданных с помощью второго закона Ньютона:

$$m_i \vec{a}_i = \sum_{i \neq j} \vec{F}_j$$

Взаимодействия между атомами описываются межатомным потенциалом $U(\vec{r_1} \ldots \vec{r_N})$, который определяет зависимость потенциальной энергии системы из N атомов от их координат. В данной работе для расчета эволюции системы атомов, система уравнений движения (1) решается с помощью алгоритма Верле в программе LAMMPS [7].

Потенциалы взаимодействия. Задание потенциала межатомного взаимодействия для молекулярно-динамических расчетов достаточно сложная задача. В данной работе применяется потенциал, полученный методом погруженного атома (МПА) [8].

Результаты. В настоящей работе были построены структуры PdH_x для разных концентраций водорода и для этих структур проведены расчеты диффузионных параметров. Концентрации внедренного водорода в системе водород-палладий могут меняться в широком диапазоне: от нуля до одного атома водорода на один атом металла. В таблице 1 представлены полученные значения параметров решетки и энергий системы водород-палладий при разных концентрациях. Видно, что с ростом концентрации водорода в интервале 0<x<1, параметр решетки и энергия решетки увеличиваются.

Таблица.1.

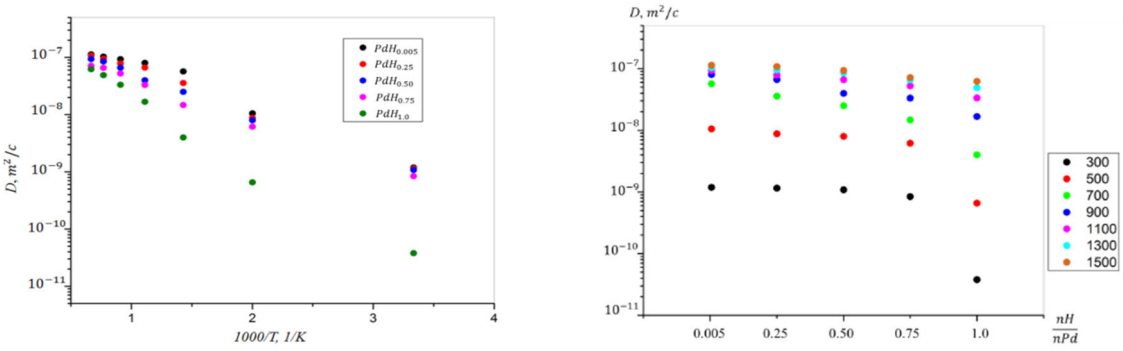
Параметр решетки и энергия системы на один атом при разных концентрациях водорода.

PdH_x	a (Å)		E (эВ)	
	Настоящий расчет	В работе [4]	Настоящий расчет	В работе [4]
0	3.885	3.885	-3.910	-3.910
0.005	3.887	3.887	-3.902	-3.901
0.125	3.940	3.939	-3.719	-3.716
0.25	3.989	3.992	-3.560	-3.563
0.5	4.088	4.092	-3.337	-3.343
0.75	4.169	4.171	-3.188	-3.193
1	4.225	4.225	-3.081	-3.081

Из зависимости среднеквадратического смещения атомов от времени при разных концентрациях и температурах, были определены коэффициенты диффузии водорода в палладии по формуле:

$$D = \frac{<\vec{r}^2(t)>}{6t}$$

Эти результаты представлены в виде графиков, показанных на рис.1. При повышении температуры коэффициенты диффузии растут. Коэффициенты диффузии с ростом концентрации уменьшаются. Это связано с уменьшением числа мест для прыжков атомов водорода.



а) б)

Рис.1. Зависимости коэффициента диффузии от температуры (а) и концентрации (б)

В таблице 2 представлены предэкспонециальные множители и энергии активации для структур PdH_x с разной концентрацией водорода.

Таблица 2.

Диффузионные параметры для водорода в палладии.

PdH_x	D_0(м^2/с)	E_a (эВ)
0.005	1.18×10^{-6}	0.195
0.25	9.10×10^{-7}	0.199
0.50	5.75×10^{-7}	0.205
0.75	4.86×10^{-7}	0.210
1.0	4.71×10^{-7}	0.256
*	2.9×10^{-7}	0.23

(*) – результаты, полученные в эксперименте [9]

Видно, что с повышением концентрации водорода D_0 уменьшается, а энергия активации увеличивается. Величины диффузионных параметров, определенных в модели, находятся в соответствии с экспериментальными и теоретическими данными других авторов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Мулюков Р.Р., Назаров А.А., Атомистическое моделирование материалов, наноструктур и процессов нанотехнологии - Учебное пособие для студентов-физиков. Уфа, РИО БашГУ, 2010.- С.156.
2. Чистякова Н.В. Моделирование структуры Pd и PdH методом молекулярной динамики // Перспективы развития фундаментальных наук: Труды XII Междунар. конференции студентов и молодых ученых. – Томск, 2015. –С. 308–310.
3. Chistyakova N. (2016) Molecular dynamics simulation of Pd and PdH structure. // Key Engineering materials. Vol 683, pp 583-588
4. Chistyakova, N. and Tran, T.M.H. (2016). A study of the applicability of different types of interatomic potentials to compute elastic properties of metals with molecular dynamics methods.// AIP Conf. Proc. Vol.1772, p.060019.
5. Larionov, V.V., Nikitenkov, N.N., Tyurin, Y.I. Hydrogen diffusion in steels under electron bombardment //Technical Physics. 2016 61 (5), pp. 793-797
6. Lider, A.M., Larionov, V.V., Syrtanov, M.S. Hydrogen concentration measurements at titanium layers by means of thermo-EMF // Key Engineering Materials . 2016. 683, pp. 199-202
7. Сайт программы LAMMPS [Электронный ресурс] Режим доступа: http://lammps.sandia.gov.
8. J.A. Zimmerman, X.W. Zhou, B.M. Wong and J.J. Hoyt (2008). An embedded-atom method interatomic potential for Pd-H alloys. Mater. Res Vol. 23, No. 3, pp 704-718
9. Максимов Е.Г., Панкратов О.А. Водород в металлах // Успехи физических наук. - 1999. - Т.116, №3. – С. 385-410.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЗИТРОННОЙ АННИГИЛЯЦИИ С ПРИМЕНЕНИЕМ ИСТОЧНИКА ПОЗИТРОНОВ 64Cu

В. Чэнь, Ю.С. Бордулев

Научный руководитель: ассистент, Ю.С. Бордулев

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: 335195531@qq.com

POSITRON ANNIHILATION STUDY USING 64CU POSITRON SOURCE

W. Chen, Y.C. Bordulev

Scientific Supervisor: assistant, Y.C. Bordulev

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

E-mail: 335195531@qq.com

Abstract. *This research is attributed to properties study of 64Cu isotope as a positron source. This isotope was obtained by neutron irradiation of copper foil in research nuclear reactor. The Doppler broadening spectrometer was used in this research to study the parameters of 64Cu. The experiment shows that, as 64Cu loses its activity, the peak to noise ratio increases, while the S parameter goes up and the W parameter goes down.*

Введение. Традиционным источником, применяемым в методах позитронной аннигиляции, является изотоп 22Na [1]. В России используется изотоп 44Ti. Однако, традиционные источники позитронов имеют ряд ограничений в использовании. Они не могут применяться при высоких температурах, а также в агрессивной среде водорода. Это ограничивает их использование в области исследования новых материалов для водородной энергетики.

Решить данную проблему может применение 64Cu в качестве источника позитронов. Данный изотоп может быть использован при высокой температуре благодаря тому, что температура плавления меди достаточно высокая (1083°C) и медь не взаимодействует с водородом. Однако, перед использованием 64Cu в методах позитронной аннигиляции, необходимо провести дополнительные исследования о применимости данного изотопа в качестве источника позитронов.

Соответственно, целью данной работы является исследование применимости источника позитронов на основе меди для методов позитронной аннигиляции.

Для достижения поставленной цели необходимо выполнить следующие задачи:

1. Получить изотоп 64Cu
2. Провести эксперимент по исследованию аннигиляции позитронов
3. Обработать данные

Изотоп 64Cu был получен путем облучения образца медной фольги (99.99%) потоком нейтронов. Вес образца составил 40мг. Облучение проводилось в исследовательском ядерном реакторе ТПУ ИРТ-Т. Образец был облучен потоком нейтронов с мощностью дозы 10^{13} нейтрон/см^2*сек. Время облучения составило 30мин. Для исследования свойств данного источника был применен спектрометр Доплеровского уширения аннигиляционной линии (ДУАЛ) [2], состоящий из γ-детектора на основе

особо-чистого германия и системы сбора и обработки данных. После облучения медного образца был выждан временной период в несколько дней для того чтобы активность материала снизилась до ~ 50 МБк. После облучения медного образца был выждан временной период в несколько дней для того чтобы активность материала снизилась до ~ 50 МБк. Далее источник был помещён между двумя бездефектными образцами титана и потом помещён перед детектором. Далее в течение 3 дней был произведен эксперимент по набору энергетических γ-спектров с помощью спектрометра ДУАЛ. Анализ сигналов включал получение зависимости соотношения доли хороших сигналов ко времени, скорости счёта, соотношения пика к шуму, а также аннигиляционных параметров ДУАЛ - S и W к активности изотопа.

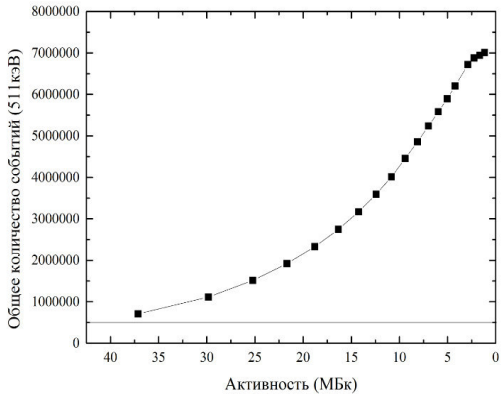


Рис.1 Зависимость общего количества событий (511КэВ) от активности 64Cu.

Результаты и обсуждение. Зависимость общего количества событий (511КэВ) и скорости сбора сигналов от активности представлена на Рис. 1 и 2, соответственно. На Рис. 1 мы видим, что общее количество событий постепенно увеличивается с уменьшением активности. Очевидно, что во всех спектрах количество событий превышает 0,5 миллиона (достаточная статистика, для получения характеристик позитронной аннигиляции с удовлетворительной погрешностью).

На Рис. 2, мы обнаружили, что сначала скорость счёта увеличивается, соответственно уменьшению активности 64Cu до около 15МБк. А затем скорость счёта постепенно снижается. Когда активность больше чем 15 МБк, событий, соответствующих β + распаду слишком много. Поэтому детектор не успевает обработать такое количество сигналов, поступающих одновременно, и это приводит к уменьшению скорости счёта.

Зависимость отношения доли хороших сигналов ко времени от активности представлена на Рис. 3. Мы видим, что сначала значение хороших сигналов увеличивается соответственно увеличению активности 64Cu до около 5 МБк, а потом постепенно снижается. При активности около 5МБк, значение хороших сигналов самое высокое.

Зависимость соотношения (пик/шум) от активности 64Cu представлена на Рис. 4. Мы видим, что сначала соотношение пика к шуму постепенно увеличивается соответственно

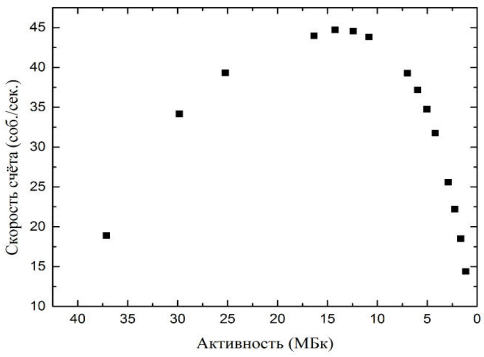


Рис. 2 Зависимость скорости счёта сигналов с детектора в зависимости от активности 64Cu.

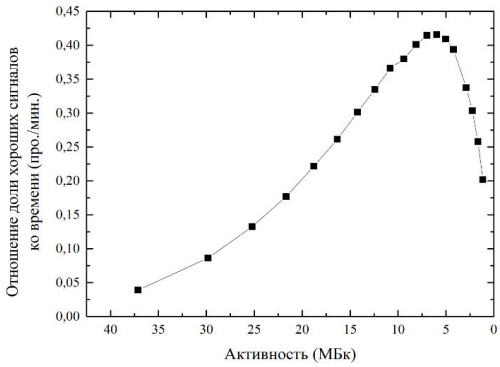


Рис. 3 Зависимость отношения доли хороших сигналов ко времени от активности.

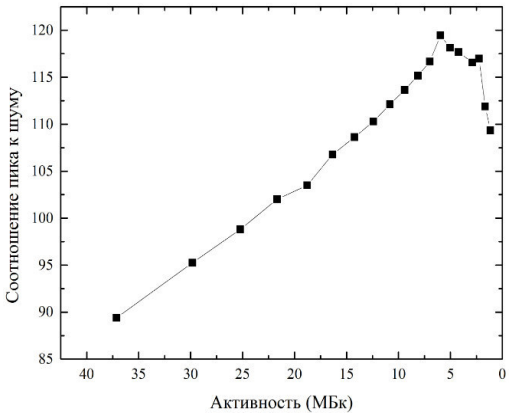


Рис. 4 Зависимость соотношения (пик/шум) от активности 64Cu

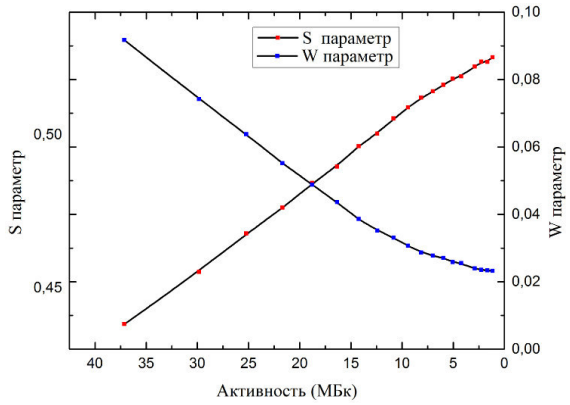


Рис. 5 Зависимость S и W параметра от активности 64Cu

уменьшению активности 64Cu до около 5МБк. А затем соотношение пика к шуму снижается. Чем выше соотношение пика к шуму, тем лучше энергетический спектр. При активности 5МБк, соотношение пика к шуму очень высокое. Таким образом, из зависимостей, представленных на Рис. 3 и Рис. 4. видно, что данная активность лучше всего подходит для эксперимента со статистической точки зрения.

Зависимость S параметра и W параметра от активности представлена на Рис. 5. Мы видим, что S параметр увеличивается и W параметр уменьшается с течением времени. Дефектная структура материала не менялась с течением времени, но с потерей активности изотопа, форма спектра изменялась. Параметры S и W, являясь параметрами формы спектра, зависят от активности. Соответственно, уменьшающаяся активность, делая пик уже и выше, приводит к увеличению S и падению W параметров. Когда активность изотопа больше чем 12.5МБк, зависимость параметров S и W от активности является линейной.

Заключение. Было проведением исследование по применимости 64Cu в качестве источника позитронов для метода позитронной аннигиляции. С уменьшением активности, S параметр увеличивается и W параметр уменьшается. Это не связано с природой материала. Это связано с изменением активности источника 64Cu. Мы видим, что зависимость S, W параметра от активности является линейной, когда активность изотопа больше чем 12.5МБк. Мы можем получить приближенную зависимость

$$y=kx+b,$$

где y-S параметр, x-активность, k и b-константы. Когда мы используем 64Cu как источник позитронов в эксперименте ЭПА, изменения активности изотопа 64Cu не будут влиять на результаты эксперимента потому, что угол между y и x не меняется, т.е. k-константа. Для осуществления эксперимента необходимо знать разницу результатов между бездефектным образцом и исследуемым образцом.

Таким образом, мы можем использовать 64Cu как источник позитронов при активности больше чем 12.5МБк.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. P. Hautojarvi. Positrons in Solids.– New York: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1979. – 3 c.
2. Jakub Cizek. Investigation of Crystal Lattice Defects in Deformation and Irradiation Damaged Solids by Means of Positron Annihilation. – Prague: Charles University Prague, 2001. – 29 c.

ПОЛУЧЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ГИБРИДНЫХ БИОКОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ НАНОТРУБОК ДИОКСИДА ТИТАНА, НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА И КАЛЬЦИЙ ФОСФАТНЫХ НАНОЧАСТИЦ

Р.В. Чернозем

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

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: romanchernozem@gmail.com

PREPARATION AND INVESTIGATION OF THE HYBRID BIOCOMPOSITES BASED ON THE TITANIA NANOTUBES, SILVER AND CALCIUM PHOSPHATE NANOPARTICLES

R.V. Chernozem

Scientific Supervisor: Ass. Prof., Dr. R.A. Surmenev

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

E-mail: romanchernozem@gmail.com

Abstract. *In this study, morphology, chemical composition and wettability of the hybrid biocomposites based on titania nanotubes (*TiO_2 NTs*), silver (Ag) and calcium phosphate (CaP) nanoparticles (NPs) were investigated.* TiO_2 *NTs were fabricated via electrochemical anodization of Ti foils at the constant voltage of 30 V for 30 min. The synthesized Ag and CaP NPs were successfully deposited on the surface of* TiO_2 *NTs using electrophoretic deposition. The hydrodynamic diameter and ζ-potential of the prepared NPs were characterized via Dynamic light scattering (DLS). According to SEM results, all the nanoparticles have a spherical shape. The wettability of the samples was investigated via a sessile droplet method.*

Введение. Нанотрубки (НТ) на основе диоксида титана (TiO_2) являются объектом внимания ученых из-за своих уникальных свойств. Внутренний объем TiO_2 НТ может использоваться для доставки биологически активных веществ с целью обеспечения более подходящего интерфейса в месте взаимодействия имплантата с соединительной тканью [1]. Создание биосовместимой и биорезорбируемой системы необходимо при контакте с костной тканью. Неорганические наночастицы такие, как кальций-фосфаты (КФ) могут быть использованы в имплантологии и ортопедии, т.к. неорганическая фаза кости состоит из КФ [2]. Для практического применения каких-либо материалов в имплантологии необходимо, чтобы риск возникновения инфекции в месте вживления имплантата был минимален. Ионы серебра (Ag) обладают бактерицидным, бактериостатическим, противовирусным, противогрибковым и антисептическим действием [3]. Наночастицы (НЧ) Ag могут быть использованы в качестве одного из компонентов для создания гибридного биокомпозита. Целью данной работы является получение гибридных биокомпозитов на основе TiO_2 НТ, Ag и КФ НЧ для биомедицинского применения, и исследование их морфологии, структуры и смачиваемости.

Материалы и методы. TiO_2 НТ получены методом электрохимического анодирования при постоянном напряжении 30 В в течение 30 мин. Для получения мелкодисперсных наночастиц коллоидного серебра использовался метод химического восстановления [4]. КФ НЧ были синтезированы

путем осаждения при помощи центрифугирования из водного раствора, содержащего $AgNO_3$, $(NH_4)_2HPO_4$ и поливинилпирролидон. Осаждения наночастиц на поверхность TiO_2 НТ осуществлялось методом электрофоретического осаждения при постоянном напряжении 50 В в течение 30 мин. Описание параметров НЧ было проведено методами динамического рассеяния света (DLS). Для исследования морфологии и химического состава полученных биокомпозитов использовался метод сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) и энергодисперсной рентгеновской спектроскопии (ЭРС), соответственно. Измерение краевого угла (КУ) смачивания образцов и расчет свободной поверхностной энергии (ПЭ), производились с использованием метода сидячей капли и Оуэнса-Вендта-Рабеля-Каелбле (ОВРК), соответственно.

Результаты и обсуждение. СЭМ исследования полученных наночастиц показали, что оба типа используемых наночастиц в данной работе имеют сферическую форму. ζ-потенциал Ag и КФ НЧ составил +(6±12) и +(22±9) мВ, соответственно. Средний ГДД для Ag и КФ НЧ составлял 62 и 378 нм. В то время как, согласно полученным данным положение пика ГДД КФ НЧ было 46 нм. Значение индекса полидисперсности (PDI-index) для КФ НЧ составляло 0,388. Данное высокое значение PDI наиболее вероятно вызвано агломерированием некоторых КФ НЧ, что в свою очередь отразилось на значении среднего ГДД. На рис. 2 представлены СЭМ изображения полученных биокомпозитов. Длина и внутренний диаметр отожжённых TiO_2 НТ составляли 909±10 и 53±5 нм, соответственно. Сферические КФ НЧ полностью покрывали поверхность TiO_2 НТ (рис. 2 в, г). В то время как, концентрация наблюдаемых Ag НЧ сферической формы на поверхности TiO_2 НТ после электрофоретического осаждения значительно ниже (рис. 2 д, е). При послойном осаждении наночастиц серебра и КФ на поверхности TiO_2 НТ наблюдается образование однородного слоя, т.е. отдельные сферические частицы на поверхности не наблюдались (рис. 2 ж, з). Из полученных результатов СЭМ видно, что частицы находятся на поверхности НТ. Однако, авторы в работе [5] показали, что Ag НЧ обладающие диаметром меньше, чем диаметр нанотрубок частично проникают внутрь нанотрубок. ЭРС анализ показал наличие Ag, Ca и P для образцов, на поверхность которых были осаждены Ag и/или КФ НЧ.

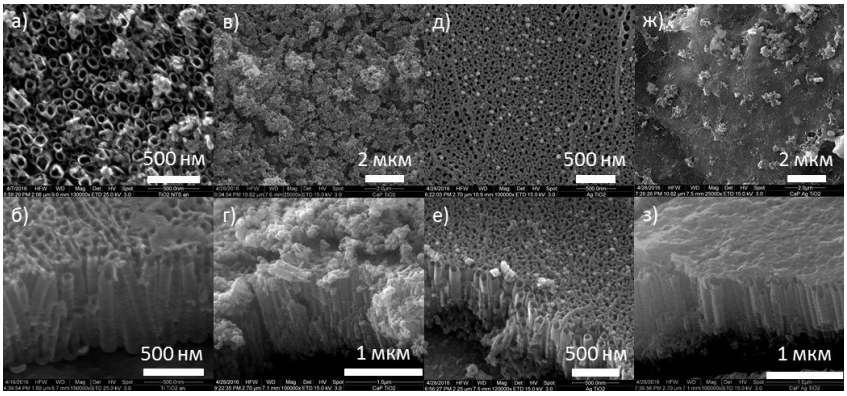


Рис. 2. СЭМ изображения отожжённых Ti_2O нанотрубок (а, б), с КФ НЧ (в, г), с Ag НЧ (д, е) и покрытые послойно сначала Ag НЧ, а после КФ НЧ (ж, з): (а, в, д, ж) – вид сверху, (б, г, е, з) – вид с боку

В таблице 1 представлены результаты измерений КУ и рассчитанных ПЭ для TiO_2 НТ и для НТ с Ag НЧ. Из полученных результатов видно, что использование Ag НЧ на поверхности НТ позволило снизить значение КУ. Измерение КУ в всех случаях использования КФ НЧ не представлялось возможным, т.к. капли моментально растекались после нанесения на поверхность исследуемых образцов, следовательно,

данные поверхности являются супергидрофильными. Значения ПЭ для НТ с Ag НЧ выше, чем для TiO_2 НТ. Необходимо отметить, что данное увеличение ПЭ произошло из-за увеличения вклада полярной составляющей в ПЭ, которая является преобладающим фактором при клеточной остеоинтеграции [6].

Таблица 1

Измерение КУ и ПЭ поверхности TiO_2 НТ без и с Ag НЧ

Образец	КУ (вода), °	КУ (этилен гликоль), °	КУ (дийодметан), °	ПЭ, мН/м
TiO_2 НТ	40±9	19±2	16±3	57,91
TiO_2 НТ + Ag НЧ	33±3	7±2	15±3	61,70

Заключение. TiO_2 НТ получены методом электрохимического анодирования. Синтезированные Ag и КФ НЧ сферической формы были успешно осаждены на поверхность НТ методом электрофоретического осаждения. КФ НЧ полностью покрывают поверхность НТ. В то время как, количество осажденных Ag НЧ на поверхность НТ значительно ниже. Успешно выполнено послойное осаждение на нанотрубки Ag и КФ НЧ, о чем свидетельствует ЭРС анализ. Однако, на поверхности НТ не наблюдались типичные НЧ сферической формы после послойного осаждения. Поверхность НТ является гидрофильной. Использование Ag НЧ позволяет снизит значение КУ, а также увеличить значение ПЭ за счет увеличения вклада ее полярной составляющей. Использование КФ НЧ позволяет сделать поверхность биокомпозита супергидрофильной. В будущем будет исследовано механическое поведение и антибактериальное действие полученных гибридных биокомпозитов.

Благодарности. Авторы выражают благодарность за проведение СЭМ измерений Др. К. Лозе, Университет Дуйсбург-Эссен, Германия, проф. Эппле. Работа была выполнена в рамках федеральной целевой программы (соглашение 14.587.21.0013 (уникальный идентификационный номер заявки 2015-14-588-0002-5599), грантов Президента для молодых ученых кандидатов наук МК-7907.2016.8, МК-6459.2016.8, и госзадания Наука (номер проекта 11.1233.2017/ПЧ).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Roguska A., Pisarek M., Andrzejczuk M., Lewandowska M., Kurzydlowski K. J., Janik-Czachor M. Surface characterization of Ca-P/Ag/TiO2 nanotube composite layers on Ti intended for biomedical applications // *Journal of Biomedical Materials Research Part A*. - 2012 - V. 100. - № 8. - P. 1954-1962.
2. Cai Y., Tang R. Calcium phosphate nanoparticles in biomineralization and biomaterials // *Journal of Materials Chemistry*. - 2008 - V. 18. - № 32. - P. 3775-3787.
3. Игнатов И. Н.-и., Мосин О. В. Методы получения мелкодисперстных наночастиц коллоидного серебра // *Интернет-журнал Науковедение*. - 2014 - № 3 (22).
4. Ahlberg S., Antonopulos A., Diendorf J., Dringen R., Epple M., Flöck R., Goedecke W., Graf C., Haberl N., Helmlinger J. PVP-coated, negatively charged silver nanoparticles: A multi-center study of their physicochemical characteristics, cell culture and in vivo experiments // *Beilstein journal of nanotechnology*. - 2014 - V. 5. - № 1. - P. 1944-1965.
5. Jiang Y., Zheng B., Du J., Liu G., Guo Y., Xiao D. Electrophoresis deposition of Ag nanoparticles on TiO 2 nanotube arrays electrode for hydrogen peroxide sensing // *Talanta*. - 2013 - V. 112. - P. 129-135.
6. Schakenraad J., Busscher H., Wildevuur C. R., Arends J. Thermodynamic aspects of cell spreading on solid substrata // *Cell Biochemistry and Biophysics*. - 1988 - V. 13. - № 1. - P. 75-91.

ВОДОРОДОПРОНИЦАЕМОСТЬ ПОКРЫТИЙ НИТРИДА ТИТАНА, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ВАКУУМНО-ДУГОВОГО ОСАЖДЕНИЯ

Чжан Ле, А.Н. Сутыгина, Е.Б. Кашкаров

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

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: 304060488@qq.com

HYDROGEN PERMEABILITY COATING OF TITANIUM NITRIDE, OBTAINED BY VACUUM ARC DEPOZITION

Zhang Le, A.N. Sutygina, E.B. Kashkarov

Scientific Supervisor, N.N. Nikitenkov

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

E-mail: 304060488@qq.com

***Abstract**. This paper is devoted to investigation of element distribution and microparticles formation during deposition of titanium nitride coatings by cathodic vacuum arc with pulsed bias voltage. The results revealed that with the increase in bias voltage from -50 to -300 V, the quantity and size of microparticles decreased.*

Введение. Нитрид титана, применяется в качестве защитного покрытия благодаря своей износостойкости, твердости и химической стабильности. Покрытия нитрида титана (TiN) получили широкое применение в различных отраслях промышленности: в качестве покрытий для режущего инструмента, коррозионно-стойких покрытий, в биомедицинских целях для имплантантов и др. Известный недостаток данного метода заключается в присутствии микрокапельной фракции в получаемом покрытии [1]. Для борьбы с микрокапельной фракцией используются различные методы, в частности используются плазменные фильтры (в данной работе используется фильтр, разработанный авторами работы [2]).В последние годы всё чаще эти покрытия используются как защитный барьер от проникновения водорода и водородного охрупчивания. Вместе с тем, процессы, приводящие к улучшению эксплуатационных и защитных свойств к настоящему времени мало изучены.

Часто перед нанесением покрытия TiN, создают подслой Ti для увеличения адгезии покрытия. В настоящей работе вместо нанесения подслоя мы используем ПИИИ.

Таким образом, целью настоящей работы является Исследование водородопроницаемости сплава Zr-1%Nb после ионно-иммерсионной имплантации титана и нанесения покрытий TiN на имплантированный титаном сплав Zr-1%Nb.

Схема эксперимента. Были проведены исследования структура (методом РФА), морфология поверхности (методом АСМ), послойное распределения элементов в модифицированном слое (методом оптической спектроскопии плазмы тлеющего разряда), водородопроницаемости (метом Сивертса) следующих образцов:1) Zr1%Nb после ионно-иммерсионной имплантации титана; 2) после нанесения покрытий TiN на Zr1%Nb и;3) после ионно-иммерсионной имплантации титана в Zr1%Nb и затем нанесения (TiN) на имплантированный Zr1%Nb.

Режим нанесения нитрида титана и ионной очистки представлен в табл.1.

Таблица.1

Параметры очистки, ПИИИ и нанесения покрытий

Параметры	Ток в разряде, А	Давление, Па	Смещение, В	Ar, %	N_2, %	Время, мин
Ионная очистка	50 (тлеющий)	0,15	1500	100	0	3
ПИИИ	70(дуговой)	0,15	500, 1000, 1500	100	0	5
Нанесение покрытия	70	0,3	0 – 300	20	80	30

Результаты и их обсуждение.

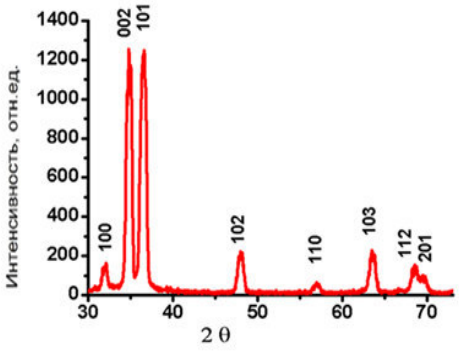


рис.1а)

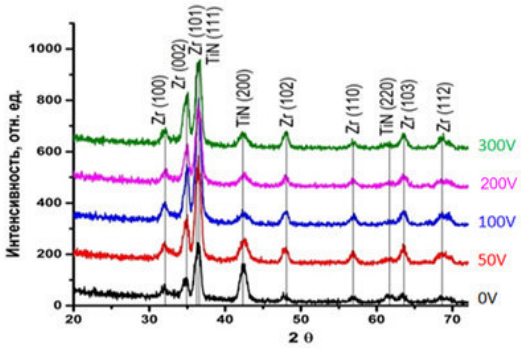


рис.1б)

Рис. 1 Рентгенограммы образцов циркониевого сплава Zr–1%Nb: а) после имплантации; б) после нанесения покрытия TiN; в) после нанесения покрытия TiN на имплантированный Zr–1%Nb.

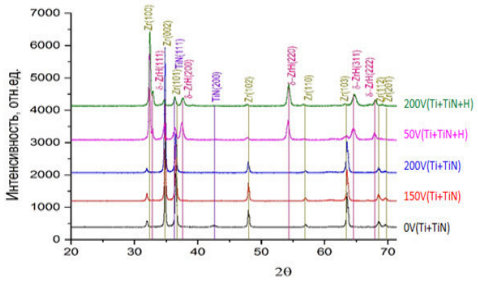


рис.1с)

Рис.2-Рентгеновские дифрактограммы образцов циркониевого сплава Zr1%Nb: а)после ПИИИ, б)после нанесения покрытия TiN, с)после ПИИИ и нанесения покрытий.

На рис. 1а) виден только Zr, то есть, титан находится в растворенном состоянии и никаких фаз Ti не формируется. Из рис. 1b), при отсутствии потенциала смещения присутствуют рефлексы в направлении плоскости (200), (220). Видно, что при увеличении потенциала смещения от -50 В до -300 В, ориентация кристаллитов TiN постепенно перерастет в направлении (111). Как правило, это изменение текстуры в покрытии TiN объясняется в термодинамическом аспекте.

Аналогичные результаты видно на рис. 1.с). Кроме этого, на рис. 1.с) показаны рефлексы ориентации δ-Zr. Образование гидрида δ-Zr указывает на проникновение большого количества водорода в глубь материала, что, может привести к ухудшению механических свойств циркониевого сплава. При относительно низком напряжения смещения (50 В) цирконий в большей мере подвержен проникновению

водорода, что, возможно, связано с образованием пленки титана на поверхности, которая активно сорбирует водород.

Исследование морфологии поверхности циркониевого сплава Zr1%Nb представлено на рис. 3. Из анализа рис. 3 следует, что в результате ПИИИ изменяется топография поверхности характеризующееся выделением зерен и наличием микрокапель.

Нанесение покрытия TiN на не имплантированную подложку приводит к микрокаплям и, по-видимому, к образованию чешуек. Нанесение покрытия TiN на имплантированную подложку (рис. 3c) приводит к практически полному исчезновению названных чешуек и уменьшению количества и размера микрокапель. Это свидетельствует о улучшении адгезии покрытия. Насыщение водородом приводит к появлению темных островков, которые, по-видимому, являются результатом взаимодействия водорода с дефектами поверхности (возможно, теми же вышеупомянутыми отслаиваниями покрытия).

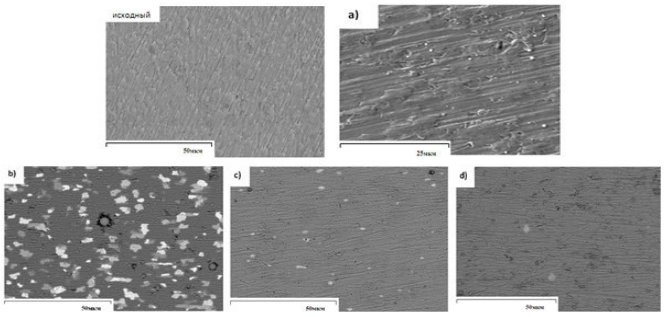


Рис. 3-СЭМ поверхности образцов циркониевого сплава Zr1%Nb *:*

a) после ПИИИ(1500V), b)после нанесения покрытия (200V),без ПИИИ, c)после нанесения покрытия на имплантированный образец(200V), d)после наводораживания образца .

Заключение. Из анализа рис. 2 и рис.3 следует, что ионно-иммерсионная имплантация из плазмы дугового разряда титана в сплав Zr1%Nb приводит к изменению морфологии поверхности. Не приводит к изменению фазового состава, но приводит к изменению параметров кристаллической решётки (к деформации решётки). То есть имплантированный титан находится в Zr1%Nb в растворённом состоянии. Из анализа рис. 2 следует, что в результате ПИИИ изменяется топография поверхности, характеризующееся выделением зерен и наличием микрокапель. Нанесение покрытия TiN на не имплантированную подложку приводит к микрокаплям и, по-видимому, к образованию чешуек (светлые пятна на рис. 2б, которые, вероятнее всего, связаны с локальными межслойными расслаиваниями покрытия [не от подложки]). Нанесение покрытия TiN на имплантированную подложку (рис. 2 с) приводит к практически полному исчезновению названных чешуек и уменьшению количества и размера микрокапель. Это свидетельствует о улучшении адгезии покрытия. Насыщение водородом приводит к появлению темных островков, которые, по-видимому, являются результатом взаимодействия водорода с дефектами поверхности (возможно, теми же вышеупомянутыми отслаиваниями покрытия

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Xu Xinlei. High quality TiN film preparation by multi-arc ion plating // Materials Protection. – 2000. – Vol. 33. – №8. – P. 28-32.
2. Ryabchikov A.I., Ryabchikov I.A., Stepanov I.B. // Vacuum. – 2005. – Vol. 78 (2-4). – P. 331-336.

АНАЛИЗ СПЕКТРА ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ МОЛЕКУЛЫ $^{32}S^{16}O^{18}O$ В ДИАПАЗОНЕ 1550 – 1950 СМ$^{-1}$

Фанцэ Чжан

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

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: 1946529618@qq.com

HIGH RESOLUTION FTIR SPECTROSCOPY OF $^{32}S^{16}O^{18}O$ IN THE 1550 – 1950 CM^{-1} REGION

Fangce Zhang

Scientific Supervisor: Prof., Dr. O.N. Ulenikov

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

E-mail: 1946529618@qq.com

Abstract. *In the present study, the high resolution infrared spectra of the $^{32}S^{16}O^{18}O$ molecule were recorded for the first time with a Bruker IFS 120 HR Fourier transform interferometer and analyzed in the region of 1550 – 1950 cm^{-1} where the bands v_1+v_2 and v_2+v_3 are located. Around 1050 and 1570 transitions were assigned in the experimental spectra with the maximum values of quantum numbers $J^{max.}$ / $K_a^{max.}$ equal to 64/16 and 58/19 to the bands v_1+v_2 and v_2+v_3, respectively. The subsequent weighted fit of experimentally assigned transitions was made with the Hamiltonian model, which considers the resonance interactions between the studied vibrational states. As the result, a set of 16 fitted parameters was obtained which reproduces the initial 1442 ro-vibrational energy values obtained from the assigned transitions with the $d_{rms} = 3.7 \times 10^{-4}$ cm^{-1}.*

Введение. Высокий уровень развития колебательно-вращательной спектроскопии молекул позволяет адекватно описывать полученную экспериментальную информацию и предсказывать свойства спектров молекул в других, отличных от исходных, спектральных диапазонах. Анализ спектров позволяет определить точные значения межатомных расстояний, частот колебаний и силовых постоянных, энергий диссоциации и других величин, характеризующих свойства многоатомных молекул. Идентификация спектра объясняет происхождение каждой линии спектра, то есть указывает между какими состояниями происходит переход, соответствующий данной линии. Таким образом, регистрируя и анализируя спектры молекул, можно получить информацию об ее энергетических уровнях. Положение уровней, в свою очередь, определяется физическими свойствами молекул.

Диоксид серы – одно из важнейших химических соединений, которое используется в научных исследованиях в таких областях как химия, астрофизика, лазерная физика и т.д. Исследование спектров высокого разрешения диоксида серы имеет важное значение для планетологии, в частности, физики и химии атмосферы Венеры, где содержание двуокиси серы в миллионы раз выше, чем в земной атмосфере [1]. Как следствие, в течение многих лет проводятся спектроскопические исследования данной молекулы в микроволновой, субмиллиметровой и инфракрасной областях.

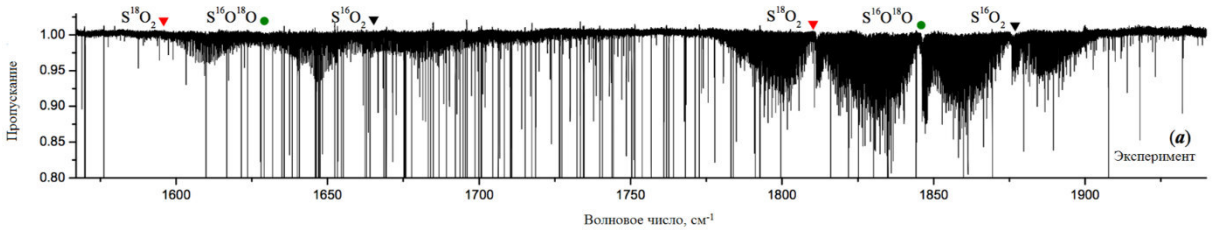


Рис. 1. Экспериментально зарегистрированный спектр молекулы $^{32}S^{16}O^{18}O$.в диапазоне 1550 – 1950 см$^{-1}$

В данном исследовании экспериментальные спектры высокого разрешения были зарегистрированы на ИК-Фурье спектрометре Bruker IFS120HR при температуре 298.15 К с разрешением между 0,0034 см$^{-1}$ (в 1500 см$^{-1}$) и 0.0040 см$^{-1}$ (в 2000 см$^{-1}$) при разных давлениях и эффективных длинах оптической пути 5 Па, 450 Па и 4 метра, 24 метра. Полученный в результате экспериментальной регистрации спектр в диапазоне 1550 – 1950 см$^{-1}$ показан на рисунке 1.

Методы исследования. Молекула $^{32}S^{16}O^{18}O$ является молекулой типа асимметричного волчка с величиной параметра асимметрии $k=(2B-A-C)/(A-C)\cong -0.945$, и группа симметрии данной молекулы изоморфна точечной группе симметрии Cs [2]. Правила отбора в данной молекуле: ΔJ = 0, ±1 и ΔK_a = 0, ±1, ±2, ±3, ..., ΔK_c = ±1, ±3, ... для любой полосы $^{32}S^{16}O^{18}O$ [3].

Для анализа экспериментальных данных была использована модель эффективного гамильтониана, который учитывает наличие резонансных взаимодействий и имеет следующий вид [4]:

$$H^{vib.-rot.}=\sum_{v,\tilde{v}}|v\rangle\langle\tilde{v}|H^{v,\tilde{v}} \qquad (1)$$

Диагональные блоки гамильтониана в данном выражении, описывающие вращательную структуру невозмущённых колебательных состояний, имеют вид оператора Уотсона [5]:

$$\begin{aligned}H^{vv}&=E^v+[A^v-\frac{1}{2}(B^v+C^v)]J_z^2+\frac{1}{2}(B^v+C^v)J^2+\frac{1}{2}(B^v-C^v)J_{xy}^2\\&-\Delta_K^v J_z^4-\Delta_{JK}^v J_z^2J^2-\Delta_K^v J^4-\delta_K^v[J_z^2,J_{xy}^2]_+-2\delta_J^v J^2J_{xy}^2\\&+H_K^v J_z^6+H_{KJ}^v J_z^4J^2+H_{JK}^v J_z^2J^4+H_J^v J^6+[J_{xy}^2,h_K^v J_z^4+h_{JK}^v J_z^2J^2+h_J^v J^4]_+\\&+L_K^v J_z^8+L_{KKJ}^v J_z^6J^2+L_{JK}^v J_z^4J^4+L_{KJJ}^v J_z^2J^6+L_J^v J_z^8+\ldots\end{aligned} \qquad (2)$$

где $J_{xy}^2=J_x^2-J_y^2$; $[A,B]_+=AB+BA$; E – центр полосы; A^v,B^v,C^v – эффективные вращательные постоянные, связанные с колебательными состояниями (v); $\Delta_K^2,\Delta_{JK}^2,\Delta_J^2$ – параметры центробежного искажения различного порядка.

Недиагональный блок описывает резонансные взаимодействия между колебательными состояниями v_1+v_2 и v_2+v_3 и имеет вид

$$H^{12}=H_F^{12}+H_{Cy}^{12}. \qquad (3)$$

Два оператора в правой стороне описывают резонансные взаимодействия типа Ферми и Кориолиса

$$H_F^{12}={}^{12}F_0+{}^{12}F_K J_z^2+{}^{12}F_J J^2+\ldots+{}^{12}F_{xy}(J_x^2-J_y^2)+\ldots \qquad (4)$$

$$H_{Cy}^{12}=iJ_xH_{12}^{(1)}+H_{12}^{(1)}iJ_x+[J_y,J_z]_+H_{12}^{(2)}+H_{12}^{(2)}[J_y,J_z]_+\ldots \qquad (5)$$

где

$$H_{12}^{(i)} = \frac{1}{2}{}^{12}C^{i} + {}^{12}C_{K}^{i}J_{z}^{2} + \frac{1}{2}{}^{12}C_{J}^{i}J^{2} + {}^{12}C_{KK}^{i}J_{z}^{4} + {}^{12}C_{KJ}^{i}J_{z}^{2}J^{2} + \frac{1}{2}{}^{12}C_{JJ}^{i}J^{4} + \ldots \quad (6)$$

Результаты. В данной работе выполнен теоретический анализ впервые зарегистрированных спектров высокого разрешения молекула $^{32}S^{16}O^{18}O$ в спектральном диапазоне 1550 – 1950 см$^{-1}$, где расположены полосы v_1+v_2 и v_2+v_3. Было проинтерпретировано около 1050 и 1570 переходов полос v_1+v_2 и v_2+v_3, с максимальными значениями квантовых чисел $J^{\max.}/K_a^{\max.}$, равными 64/16 и 58/19, соответственно.

В результате решения обратной спектроскопической задачи были определены параметры эффективного гамильтониана, который учитывает резонансные взаимодействия между исследуемыми полосами. В результате анализа набор из 16 спектроскопических параметров получен из «подгонки» со среднеквадратичным отклонением $d_{rms} = 3.7 \times 10^{-4}$ см$^{-1}$.

Таблица 1

Спектроскопические параметры колебательных состояний (110) и (011) молекулы $^{32}S^{16}O^{18}O$ (в см$^{-1}$)

Параметр	v_1+v_2 (110)	v_2+v_3 (011)
E	1628,186942(51)	1846,149452(27)
A	2,01016454(77)	1,98799762(52)
B	0,32291319(19)	0,32337318(14)
C	0,276260917(94)	0,27626904(11)
$\Delta_K\times10^4$	0,915302(85)	0,886838(91)
$\Delta_{JK}\times10^5$	−0,36439(81)	−0,39245(86)
$\Delta_J\times10^6$	0,19657(12)	0,19926(11)
$^{12}C_K^1\times10^4$	0,228(56)	-
$^{12}C_J^1\times10^6$	0,382(79)	-

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. E. Marcq, J.-L. Betraux, F. Montmessin, D. Belyaev // Nat Geosci. 2013. № 6. С.25–28.
2. Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул / Г. Герцберг. –М.: Изд-во иностранной литературы, 1949. – 647 с.
3. Макушкин Ю. С., Улеников О. Н., Чеглоков А. Е. // Симметрия и ее применения к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул, Ч. 1. – Томск: Изд-во Том. Ун-та, 1990. – 248 с.
4. Макушкин Ю.С., Улеников О. Н., Чеглоков А. Е. // Симметрия и ее применения к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул, Ч. 2. – Томск: Изд-во Том. Ун-та, 1990. – 234 с.
5. Watson J. K. G. // Mol. Phys. 1968. V 15. P 479.

РАСЧЁТ ПОГЛОЩЁННОЙ ДОЗ ИОНИЗИРУЮЩЕГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ПЛЕНКОЙ ПВДФ

Чжан Юй

Научный руководитель: Ассистент, Н.А. Дуброва

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: 1664159229@qq.com

ABSORBED DOSE OF RADIATION ON FILMS OF PVDF

Zhang Yu

Scientific Supervisor: Assistant N.A. Dubrova

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

E-mail: 1664159229@qq.com

Abstract. *The report studies the interaction of radiation with PVDF. Radiation is widely used for the modification of polymeric materials. It shows that the radiation can change the structures of PVDF. The final result depends on the type of the radiation and the absorbed radiation dose. Therefore, the correct calculation of the absorbed radiation dose, taking into all the account of all the parameters and characteristics of the material and the energy of the beam particles is very important in this field of science. Different types of radiation with the same initial energy causes different results.*

Введение. Ионизирующее излучение широко применяется для модификации полимерных материалов. Радиационно-химические технологии позволяют получать материалы с новыми или улучшенными свойствами. Радиационно-химические методы модификации полимерных пленок широко используются для создания протон-проводящих мембран с улучшенными свойствами

При радиационно-химической модификации пленок используются различные виды ионизирующего излучения. Конечный результат зависит в большей степени не от вида излучения, а от поглощенной дозы излучения. Поэтому точный и правильный расчет поглощенных доз, с учетом всех параметров и особенностей материала и энергетического пучка частиц очень важен в этой области науки.

Материалы и методы исследования. В работе представлены результаты расчетов флюенса и поглощенных доз в пленке поливинилиденфторида толщиной 20 мкм при воздействии на нее пучками α-частиц и протонов заданных параметров.

Начальная энергия α-частиц составляла 15МэВ, плотность тока пучка 0,5мкА/см^2. Начальная энергия протонов – 1,7МэВ, плотность тока пучка 1мкА/см^2. Толщина пленки ПВДф 20мкм.

Для оценки поглощённой дозы образцом пленки ПВДФ необходимо рассчитать удельные потери энергии и флюенс частиц,. Флюенс может быть оценен, используя формулу:

$$\varphi = \frac{It}{q}$$

Для заряжённых частиц, движущихся в веществе с достаточно большой скоростью, количественной характеристикой потерь энергии заряженной частицы является величина (dE/dx), называемая удельной потерей энергии. Для получения величины удельной потери энергий использовать уравнение Бете-Блоха:

$$\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi z^2 e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 m v^2} N_A \frac{Z}{A} \rho * \ln[\frac{2mv^2}{I(1 - v^2/c^2)}]$$

Поглощенная получается с помощью этой формулой:

$$D = \frac{dE}{dm}$$

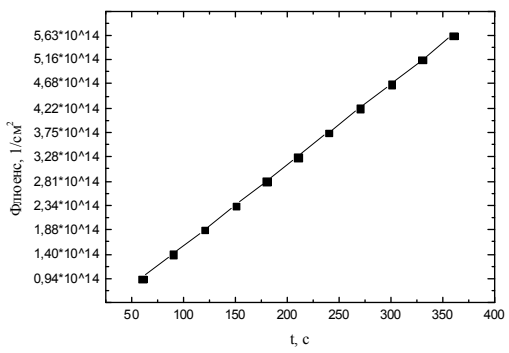
Чтобы оценить тормозную способность, необходимо определить длину пути, пройденного в веществе, называемую пробегом R.

$$R = \int_0^E \frac{dE}{-\frac{dE}{dx}}$$

Результаты. Для заданных параметрах пучка были рассчитаны пробеги α-частиц и протонов в пленке ПВДФ. Пробеги α-частиц с энергией 15 МэВ в пленке ПВДФ составляют 118 мкм. Пробег протонов в этом материале при энергии пучка 1,7 МэВ составляют 33,3 мкм. Из расчетов видно, что рассматриваемые частицы с представленными энергиями пучка проходят через всю толщину пленки.

Удельные ионизационные потери энергии α-частиц с начальной энергией 15 МэВ составляют $2{,}02*10^{-9}$ Дж/(кг/м^2). Удельные ионизационные потери энергии протонов с энергией 1,7 МэВ – $8.22*10^{-9}$ $2{,}02*10^{-9}$ Дж/(кг/м^2).

Были рассчитаны поглощенные дозы для каждого вида ионизирующего излучения в интервале времени облучения от 0,5-6 мин. А так-же оценена величина флюенса для заданного интервала времени. Полученные зависимости представлены на рисунках 1 и 2.



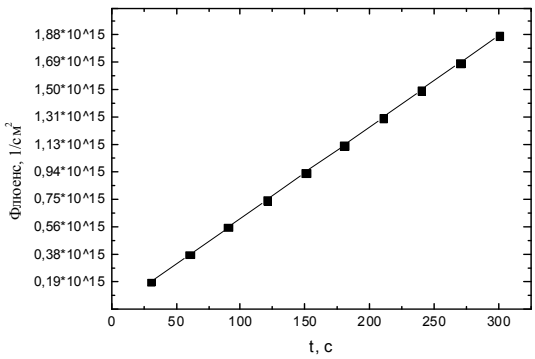


Рис 1 Зависимость флюенса частиц от времени облучения:(а) α-частиц, (б) протонов

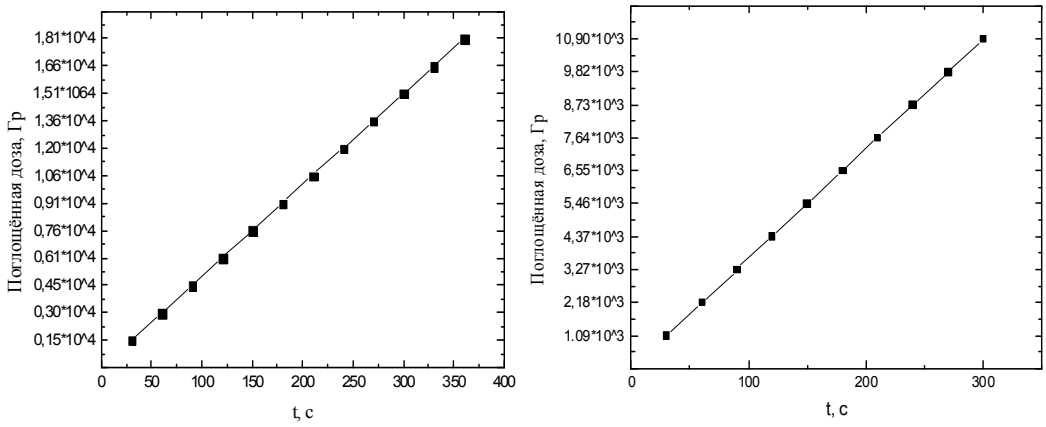


Рис 2 Зависимость поглощённой дозы частиц от времениј облучения:(а) α-частиц, (б) протонов

Заключение. Ионизирующее излучение применяется для модифицирования пленок полимеров. Используя законы Бете-Блоха и Брэгга были рассчитаны поглощенные дозы в пленке ПВДФ толщиной 20 мкм при воздействии на нее пучками α-частиц и протонов с заданными параметрами пучка. Полученные зависимости необходимы при проведении экспериментальных работ по облучению пленок ПВДФ на ускорителях с параметрами пучка, используемых при расчетах, представленных в работе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУЛЫ

1. Взаимодействие излучений с веществом– режим доступа: http://teachmen.ru/work/interaction/

2. Трофимов А.Н., Кузнецова Я.В. Взаимодействие электронная пучка с образцом/ Санкт-Петербург, 2011, Редакция 1.1

АНАЛИЗ МИКРОСТРУКТУРЫ ПЛЕНОК НА ОСНОВЕ ОКСИНИТРИДОВ ТИТАНА, ОСАЖДЕННЫХ МЕТОДОМ РЕАКТИВНОГО МАГНЕТРОННОГО РАСПЫЛЕНИЯ

Сунь Чжилэй, М.Е. Конищев, А.А. Пустовалова
Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. В.Ф. Пичугин
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050
E-mail: 1609547236@qq.com

MICROSTRUCTURE ANALYSIS OF TITANIUM OXYNITRIDE FILMS DEPOSITED BY REACTIVE MAGNETRON SPUTTERING

S. Zhilei, M.E. Konishchev, A.A. Pustovalova
Scientific Supervisor: Prof., Dr. V.F. Pichugin
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050
E-mail: 1609547236@qq.com

Abstract. *This paper presents the structure analysis results of* TiO_xN_y *films, deposited using reactive magnetron sputtering with different* O_2/N_2 *flow ratio. The impact of increase of* N_2 *flow upon the films structure has been studied. The analysis was carried out by X-ray diffraction method. The lattice parameters and phase composition were calculated using PowderCell 2.4.*

Введение. Проблема биосовместимости поверхности медицинских имплантатов является одной из актуальных проблем медицинского материаловедения. Особенно остро она стоит в сосудистой и кардиохирургии, в которой после имплантации, велика вероятность повторного сужения просвета кровеносного сосуда в области стента. Тромбоз и рестеноз являются главными осложнениями после стентирования, которые вызываются, главным образом, пролиферацией эндотелиальных клеток (ECs) и гладкомышечных клеток сосуда (VSMCs), соответственно. Для предотвращения нежелательной реакции организма на сосудистые эндопротезы, на их поверхности создаются покрытия, обладающие свойствами гемосовместимости [1,2].

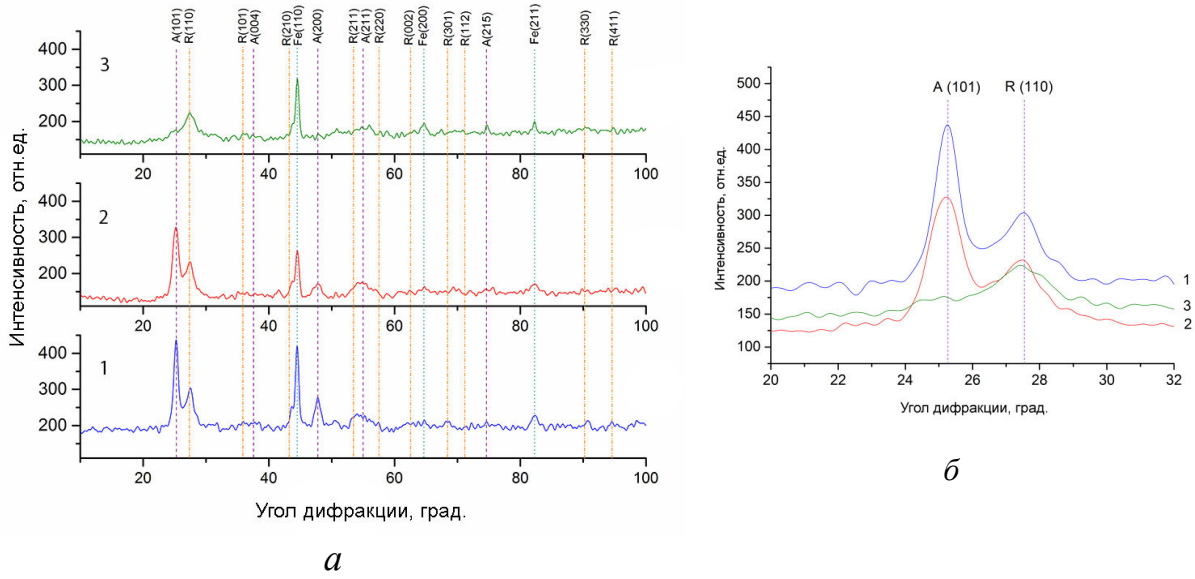
Учитывая возможность применения стента на долгий срок и его необходимые эксплуатационные свойства, обычно на поверхности материала стента, который может надолго находиться в сосуде, осаждают тонкую пленку для улучшения физико-механических и биосовместимых свойств. В качестве материала стента часто используют нержавеющую сталь L316, которая известна хорошими механическими свойствами и высокой коррозионной стойкостью, но может вызвать воспаления в результате высвобождения токсичных ионов никеля [3]. Одним из перспективных материалов для улучшения биосовместимости являются пленки оксинитрида титана TiO_xN_y с учетом их гемосовместимостимых и антитромбогенных свойств.

Для осаждения пленок использован метод реактивного магнетронного напыления, который позволяет контролировать химический состав получаемого покрытия и получать покрытия толщиной до 1мкм с необходимыми физико-механическими свойствами. Известно, что свойства материала определяются структурой. Физико-механические свойства пленки TiO_xN_y, в основном, связаны с её структурой и химическим составом. Оптические и биосовместимые характеристики определяются

присутствием диоксида титана [4]. Существует две основных фазы оксида титана: анатаз и рутил, которые характеризуются высокими фотокаталитическими свойствами и биохимической стабильностью, соответственно. На основе вышеизложенного можно полагать, что структурный анализ пленки TiO_xN_y имеет важное значение для разработки режима осаждения пленки и контроля процесса осаждения с целью получения пленок с необходимыми свойствами.

Материалы и оборудования. Осаждение пленки проведено на установке импульсного магнетронного распыления "УВН-200МИ". Режим осаждения: материал катода - Ti, материал подложки - нержавеющая сталь L316, расстояние между подложкой и магнетроном – 100 мм, рабочее давление в камере - 10^{-1} Па, мощность 1кВт, ток 3 А, соотношение объемных расходов O_2/N_2 - 1/0, 1/1 и 1/3. XRD измерения сделаны на дифрактометре BrukerD8 Advance, излучение Cu$K\alpha$ (λ = 0.15418 нм), в геометрии Брэгга–Брентано. Условие измерения: режим рентгеновской трубки – напряжение 40 кВ и ток 20 мА, диапазон углов 2θ - 4°–100°, шаг сканирования 0.02°, время экспозиции 6 с.

Результаты и обсуждение. На рисунке 1 представлены дифрактограммы для образцов с пленками TiO_2, TiON 1-1, и TiON 1-3, и график изменения интенсивностей дифракционных пиков.



а *б*

Рис. 1.Дифрактограммы от образцов с пленками из TiO_2 и Ti-O-N с различным содержанием азота (а) и изменение интенсивности дифракционных пиков (б): 1 – TiO_2; 2 – TiON-1/1; 3 – TiON-1/3 (A – анатаз; R – рутил; Fe – железо).

Анализ дифракционных картин показывают, что в пленках TiO_2, TiON 1-1, и TiON 1-3 присутствуют фазы оксида титана - анатаз и рутил с разными объемными долями. Пик Fe относится к подложке. В дифрактограммах отсутствуют пики нитрида титана. Можно предположить, что в пленках существуют нанокристаллы TiO в виде анатаза и рутила, которые располагаются в аморфной матрице TiO_xN_y. Данное описание соглашается с результатом измерения у других авторов [6].

Были рассчитаны параметры решетки и объемные доли фаз, которые представлены в таблице 1.

Полученные данные показывает, что увеличение содержания азота в пленках приводит к изменению интенсивности дифракционных рефлексов (рис. 1 (б)), что обусловлено изменением фазового

состава покрытий. Увеличение содержания азота приводит, к уменьшению объемной доли анатаза в пленках и увеличению рутила, а так же к ослаблению преимущественных ориентаций.

Таблица 1

Данные о фазовом составе, параметрах кристаллической решетки, рассчитанные с помощью программы PowderCell 2.4 для образцов с пленками Ti-O-N.

Пленки	Параметры решетки, нм		Объемная доля фазы, %	
	анатаз	рутил	анатаз	рутил
TiO_2	a=0.38020	a=0.45982	60	38
	c=0.95485	c=0.30065		
TiON-1/1	a=0.37883	a=0.45837	58	38
	c=0.95627	c=0.29565		
TiON-1/3	a=0.37578	a=0.45990	22	68
	c=0.96790	c=0.29401		

По теории роста пленки, кристаллическая структура образуется, когда частицы в пленке имеют достаточно высокую скорость движения, чтобы сформировать покрытие в области минимальной энергии. При увеличении объемного расхода азота, вероятность сталкивания между распыленными частицами и частицами в плазме увеличивается, это приводит к уменьшению энергии налетающих частиц к подложке. В результате мало вероятно образуются структуры с меньшей энергией – кристалл и развитие кристаллов с явной преимущественной ориентацией.

Заключение. В процессе работы изготовлены пленки на основе TiO_xN_y, с разными соотношениями O/N. Исследованы дифрактограммы для образцов, рассчитаны параметры решетки и фазовые доли анатаза и тутила в составе покрытий. Показано, что увеличение содержания азота в пленках приводит к уменьшению объемной доли кристаллической фазы анатаза и изменению соотношения фазовых долей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. C.C. Mohan. In vivo hemocompatibility and vascullar endothelial cell functionality on titania nanostructures under static and dynamic conditions for improved coronary stenting applications // Acta Biomaterialia. – 2013. – № 9. – С. 9568–9577.
2. Shuilin Wu. Functionalized TiO_2 Based Nanomaterials for Biomedical Applications // Adv. Funct. Mater. – 2014. – № 24. – С. 5464–5481.
3. Qiaoling Huang. Reduced platelet adhesion and improved corrosion resistance of super hydrophobic TiO_2-nanotube-coated 316L stainless steel // Colloids and Surfaces B: Biointerfaces. – 2015. – № 125. – С. 134–141.
4. Tao Sun. Characteristics and in vivo biological assessment of (Ti, O, N)/Ti composite coating formed on NiTi shape memory alloy // Thin Solid Films. – 2011. – № 519. – С. 4623–4628.
5. Y.X. Leng. Structure and Properties of Ti-O-N Films Synthesized by Reactive Magnetron Sputtering // Physics Procedia. – 2011. – № 18. – С. 40–45.

ИЗМЕРЕНИЕ ЭНЕРГИИ АКТИВАЦИИ ВОДОРОДА В ТИТАНОВОМ СПЛАВЕ ВТ1-0 МЕТОДОМ ТЕРМОЭДС

Чжоу Хао

Научный руководитель: профессор В.В. Ларионов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: 326766782@qq.com

MEASURING ACTIVATION ENERGY OF HYDROGEN IN TITANIUM ALLOYS BY VT1-0 THERMOEMF

Zhou Hao

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

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

E-mail: 326766782@qq.com

Abstract. *The thermo-emf of hydrogenated titanium were measured. We have compared the methods regarding their sensitivity to the alteration of thermo-emf during titanium hydrogenation. It was demonstrated that the method implementing thermo-emf is sensitive to hydrogen concentration in titanium at different depth of the alloy. On the basis of performed measurements, we have proposed a graphical method for the hydrogen concentration in titaniume.* The effect can be used for hydrogenated titanium structure control.

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. Это вызвано тем, что наличие дефектов в металлах и сплавах оказывает существенное влияние на параметры поглощения и распределения водорода в материалах. В тоже время индуцированные водородом дефекты вызывают, во многих случаях, необратимые изменения физико-механических свойств металлов и сплавов [1, 2]. Причиной водородной хрупкости является генерация дефектов, их аномальный рост, коагуляция вакансий, при их стабилизации водородом, что характерно и для процессов пластической деформации титана [1]. Целью работы является применение измерения термоэдс для контроля и анализа наводороживания титана в различных условиях.

Материалы и методы. Для исследования применяли технически чистый титановый сплав 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 [2, 3]. После насыщения были проведены измерения концентрации водорода при помощи анализатора водорода RHEN602 фирмы LECO. Измерение сопротивления образцов титана на постоянном токе проводили с использованием программно-измерительного комплекса «KEIHLEY INSTRUMENTS». Измерение величины термоэдс проводили на установке [4] с электродом из золота.

Теоретическая часть. Известно, что зависимость термоэдс для металлов имеет довольно сложный характер и для переходных металлов, к которым относится исследуемый сплав титана, определяется формулой

$$E = \frac{\pi^2 k_B^2 T}{3|e|}\left[\frac{1}{N_d}\frac{\partial N_d}{\partial \varepsilon} - \frac{1}{F}\frac{\partial F}{\partial E}\right]_{\varepsilon=\varepsilon_F} \qquad (1)$$

где $\kappa_Б$ — 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 в основном определяется изменением первого слагаемого выражения. Величина $dN_d/d\varepsilon$ зависит от плотности электронных состояний в d-зоне и с приближением уровня Ферми к верхней границе зоны становится отрицательной.

В области температур, где проводимость изменяется по активационному закону, экспериментальная температурная зависимость термоэдс в таких системах, как правило, описывается тем же выражением, что и для кристаллических полупроводников:

Для нахождения температурной зависимости термоэдс в неупорядоченных структурах можно использовать формулы, использованные в теории перколяции. Если проводимость определяется рассеянием на дефектах, то термоэдс можно записать формулой Звягина:

$$E_s = \frac{k_B}{e} k_B (T_0 T)^{1/2} \frac{\partial(\ln g(E_F))}{\partial E} \qquad (2)$$

где g(Ep) - плотность состояний на уровне Ферми. Поэтому анализ можно проводить путем построения зависимостей $E(T^{1/2})$ и $E(1/T)$. Температуры, при которых происходит отклонение от основной зависимости изменяются в пределах от 300 К до 360 К. При повышении температуры величина термоэдс асимптотически зависит от температуры [4]:

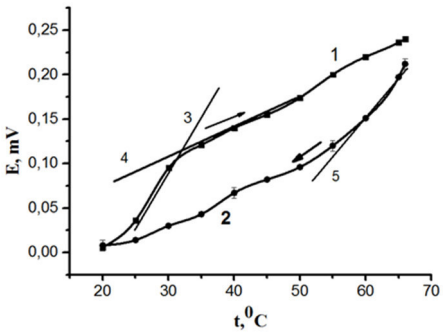


Рис. 1. Зависимость величины термоэдс от температуры (1- нагревание, 2 – охлаждение, 3, 4 касательные к кривой 1, 5 – касательная к кривой 2)

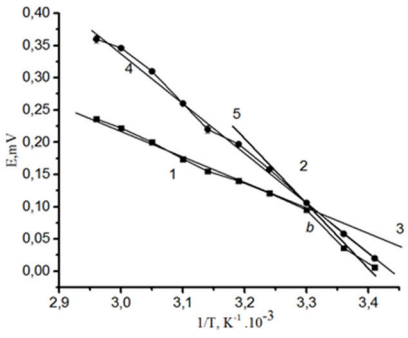


Рис.2. Зависимость величины термоэдс от 1/T (1- концентрация водорода СН – 0.07%, 2 – 0.7%, 3, 5 – касательные к кривой 1; 4 – касательная к кривой 2, b – точка перегиба кривой 1)

Возможное объяснение этих результатов (рис. 1-2) можно связать с тем, что проводимость насыщенного водородом титана в исследованном диапазоне температур σ (T) можно представить, как сумму двух вкладов: рассеяния на дефектах и активационного:

$$\sigma(T) = \sigma_a(T) + \sigma_h(T), \qquad (3)$$

где σ_a (T) - активационный вклад, σ_h(T) – проводимость обусловленная дефектами. Этот эффект объясняет точку перегиба на кривой, обнаруженной в работе [3] и может быть использован для анализа облученного титана [4].

Известно, что проводимость у титана с высоким содержанием водорода изменяется в 6 - 10 раз. Из этого можно сделать вывод, что вклад $\sigma_a(T)E_a(T)$ существенно превышает вклад, обусловленный проводимостью при рассеянии электронов на дефектах $\sigma_h(T)$ $E_h(T)$. Поэтому температурная зависимость термоэдс пропорциональна 1/T (Рис. 3).

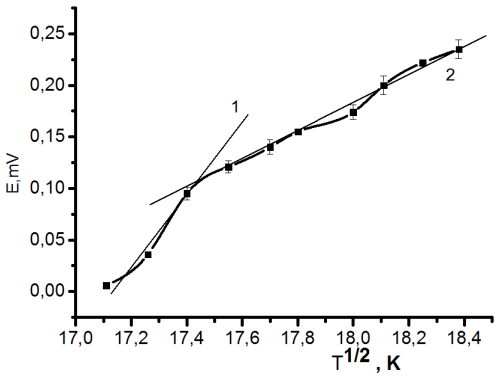


Рис. 3. Зависимость термоэдс (формула (3)) от температуры (1 –касательная для низких температур, 2 – касательная для температур выше 300 К)

Для образцов из титана термоэдс пропорциональна 1/T во всём температурном участке исследования [2]. Вычисление энергии активации проводили по формуле (2).

Выводы. Энергия активации электронов в наводороженном титане при изменении концентрации водорода от 0.07% до 0.7 % (рис. 2) изменяется в пределах от 3 до 7,5 эВ. Таким образом, метод обладает достаточной чувствительностью по отношению к изменению контракции водорода в титане.

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., 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 Ларионов В.В., Лидер А.М. Влияние водорода на проводимость титана в условиях облучения электронами // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2014.– Т. 57.– № 11-2. – С. 124–128.

МИГРАЦИЯ ВОДОРОДА В ТИТАНЕ. ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

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

MIGRATION OF HYDROGEN IN TITANIUM. STUDY ELECTRIC METHODS

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*

Введение. В предыдущей работе [1, 2] было показано, что миграцию водорода в титане можно описать классическим уравнением диффузии, если использовать уравнение $C_H = kU_{ec}$, где U_{ec} напряжение на измерительной катушке вихретокового спектрометра ЗМА-II, k – коэффициент пропорциональности, который определяют экспериментально с использованием независимых способов определения концентрации водорода. В [3] для исследования диффузии использована мембрана. Однако этот метод не приспособлен для технологического контроля. В целом процесс миграции водорода является значимым при производстве и эксплуатации изделий из титановых сплавов [4]. Альтернативным методом анализа является метод измерения термоэдс [5]. Исследование чувствительности данного метода при его относительной простоте представляет актуальную задачу. Целью данной работы является разработка чувствительных и оперативных методов контроля процессов миграции водорода методом измерения термоэдс.

Материалы и методы. Материалом для исследования служил сплав титана ВТ1-0. 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 [3] и электролитическим методом. После насыщения были проведены измерения концентрации водорода при помощи анализатора водорода RHEN602 фирмы LECO. Послойное измерение содержания водорода проведено на магнитном спектральном анализаторе (МСА) с применением методов чувствительности, предложенными авторами в работе [5-6]. Сопротивления образцов титана на постоянном токе измерено с использованием программно-измерительного комплекса «KEIHLEY INSTRUMENTS». Для сравнения результатов измерения абсолютного значения содержания водорода применяли данные послойного содержания водорода [7]. Измерение величины термоэдс проводили на установке [8] 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 мм^2. Полученные значения термоэдс совпадают с известными данными с погрешностью не превышающей 6 %.

Результаты. Температуру зонда изменяли в пределах от 20 до 70 ^{0}C. Данные измерений представлены графически на рисунках 1- 3 для изотермы 50 ^{0}C. Максимум значения термоэдс начинает смещаться вдоль пластины. При этом обращает внимание тот факт, что его величина остается постоянной (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 измерение величины термоэдс осуществлялось для обратной стороны пластины, что позволяет контролировать миграцию водорода по двум координатам одновременно.

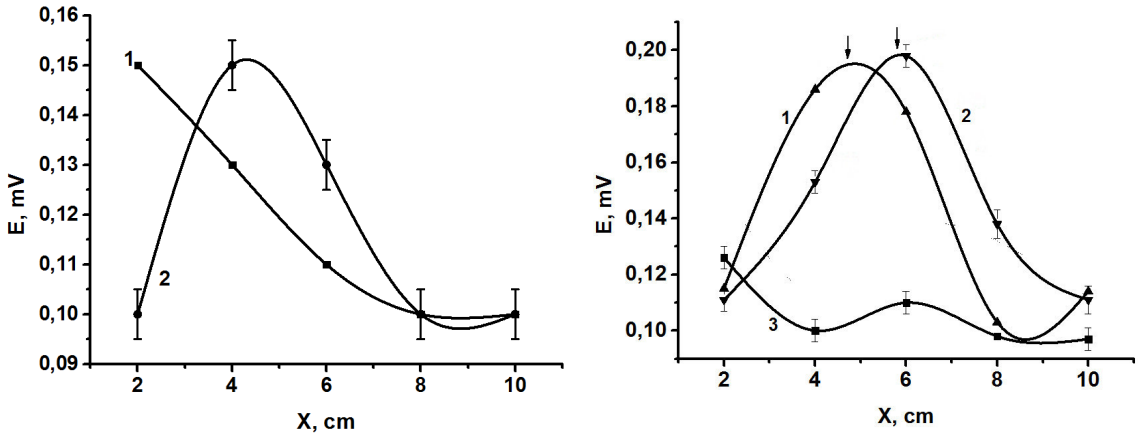


Рис. 1. Изменение зависимости величины термоэдс от координаты зонда по длине титановой платины (1- начальное значение термоэдс наводороженной пластины, 2 – через 144 часа)

Рис. 2. Изменение профиля зависимость величины термоэдс от времени и координаты положения зонда на наводороженной пластине (1, 2 – t = 50 ^{0}C, наводороженная сторона пластины (время анализа Δ m = через 480 часов, стрелками показано смещение по координате пластины)). Кривая 3 для обратной стороны пластины t = 480 час)

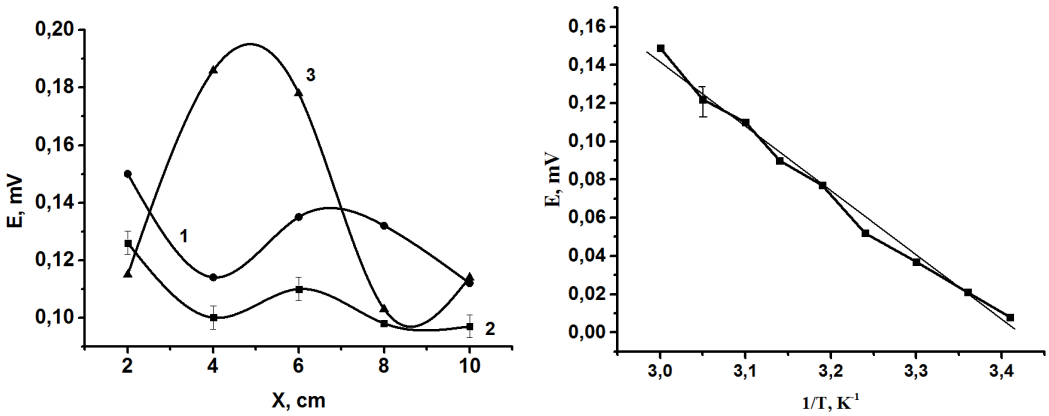


Рис. 3. Изменение профиля зависимость величины термоэдс от времени и координаты положения зонда на наводороженной пластине (1 – t = 50 ^{0}C, 2 - t = 60 ^{0}C, 3 - t = 50 ^{0}C – наводороженная сторона пластины (время анализа через 240 часов)). Кривые 1 и 2 для обратной (не токовой части) стороны титановой пластины

Рис. 4 (справа). Зависимость термоэдс от 1/T для координаты x = 2 см

Анализ графиков зависимости термоэдс от величины обратной температуры 1/T позволяет измерить величину энергии активации электронов наводороженного титана, что дает дополнительную информацию по наличию дефектности структуры материала. При этом угол наклона кривой E = f(1/T) зависит от координаты и времени миграции водорода вдоль пластины.

Заключение. Выводы. 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 изотермы. Поэтому комплекс изотерм существенно расширяет информационную базу метода. Метод может быть легко распространен н другие металлы при наличии номограмм.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Чжу Ибо, Сюй Шупэн, Ларионов В.В. Исследование диффузии водорода в титане ВТ1-0 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. Сюй Ш., Ши К., Ларионов В.В. Влияние водорода на электропроводность титана // В сборнике: Перспективы развития фундаментальных наук. Сборник научных трудов XII Международной конференция студентов и молодых ученых. Национальный исследовательский Томский политехнический университет. – 2015. – С. 251–253.
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 2016 Instruments and Experimental Techniques 59 (5), pp. 772-774.
4. Моисеев В.Н. Конструкционные титановые сплавы в современном машиностроении // Металловедение и термическая обработка металлов. – 2004. – № 3. – С. 23–29.
5. Ши К., Сюй Ш., Ларионов В.В. Влияние водорода и кислорода на электропроводность меди // В сборнике: Перспективы развития фундаментальных наук Сборник научных трудов XII Международной конференция студентов и молодых ученых. Национальный исследовательский Томский политехнический университет. 2015. С. 314-316.
6. Сюй Шупэн, Ларионов В.В. Измерение наводороженного титана электрическими методами // В сборнике: Перспективы развития фундаментальных наук. Сборник научных трудов XIII Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых: в 7 томах. – 2016. – С. 268–270.
7. Larionov, V.V., Lider, A.M., Krasnov, D.N. Measurement Techniques Measurements of the Laminar Concentration of Hydrogen in Titanium Using Eddy Currents Of Different Frequency. (2014). Measurement Techniques 57 (5), pp. 564–568.
8. 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.

ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ НАНОДИСПЕРСНОГО W ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙТСВ Al-Si СПЛАВОВ

А.В. Чумаевский[1], Н.В. Мартюшев[2]

Научный руководитель: ст. препод., к.ф.-м.н. А.П. Зыкова[2]

[1] Институт физики прочности и материаловедения СО РАН,

Россия, г.Томск, пр. Академический, 2/4, 634055

[2] Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: zykovaap@mail.ru

PROSPECTS OF USING W NANOPOWDERS FOR IMPROVING OF MECHANICAL PROPERTIES OF Al-Si ALLOYS

A.V. Chumaevskii[2], N.V. Martyushev[1]

Scientific Supervisor: Assist. Prof., PhD. A.P. Zykova[2]

[1] Institute of Strength Physics and Materials Science SB of RAS, Russia, Tomsk, Akademicheskii ave., 2/4, 634055

[2] Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: zykovaap@mail.ru

Abstract. *The studies of the mechanical properties of Al-Si alloys subjected to modification by wolfram nanopowder during casting have been undertaken. It has been established that the content of the wolfram nanopowder in the amount of 0.1 mass.% in the melt leads of silumins to an increase of the tensile strength and the impact toughness on average by 40 %, and the relative elongation – 1.5–2 times.*

Актуальность настоящей работы обусловлена тем, что, несмотря на значительные успехи в исследованиях различных ультрадисперсных добавок *d*- и *f*-металлов на рост и размеры дендритов α-Al, эвтектического Si, Fe-содержащих фаз и механические свойства силуминов [1-7], в литературе отсутствуют данные о влиянии нанодисперсных порошков W на формирование структурно-фазового состояния и механические свойства Al-Si сплавов. Следует отметить, что в литературе имеется достаточно данных о положительном влиянии ультрадисперсных порошков W, а также различных соединений на их основе на механические свойства Fe–C сплавов различной номенклатуры. Кроме того, имеются данные о положительном влиянии лазерного легирования WC поверхностного слоя Al-Si сплава, приводящего к измельчению структурных составляющих приповерхностного слоя и упрочнению за счет частиц карбидов вольфрама WC и W_2C [8]. Таким образом, целью данной работы являлось исследование влияния добавок нанопорошка W на механические свойства Al-Si сплавов.

Для исследования были выбраны широко используемые сплавы АК7 и АК9. Химический состав исследуемых сплавов приведен в таблице 1. Для модифицирования силуминов использовали нанопорошок W, полученный электровзрывным способом со средним размером частиц 240–380 нм и площадью удельной поверхности 1,7-2,4 $м^2/г$. Плавка силуминов осуществлялась в муфельной печи. Модификатор вводился в расплав после очистки поверхности от окислов и шлака. Количество вводимого в расплав силуминов нанопорошка W составляло, масс. %: 0,01; 0,05; 0,1; 0,25; 0,5. Температура расплава

при заливке составляла 800 ºС и контролировалась с помощью термопары. Механические испытания на прочность, пластичность и ударную вязкость проводили по ГОСТ 1497-84 и ГОСТ 9454-78.

Таблица 1

Химический состав сплавов АК7 и АК9

Силумин исходный	Содержание химического элемента, масс. %, остальное – Al						
	Si	Fe	Cu	Mn	Zn	Ti	Mg
АК7	6,0	0,8	1,2	0,4	0,5	0,04	0,19
АК9	8,2	0,6	0,2	0,2	0,02	0,02	0,06

Результаты механических испытаний сплава АК7 и АК9 до и после введения 0,01–0,5 масс. % W представлены на рис. 1.

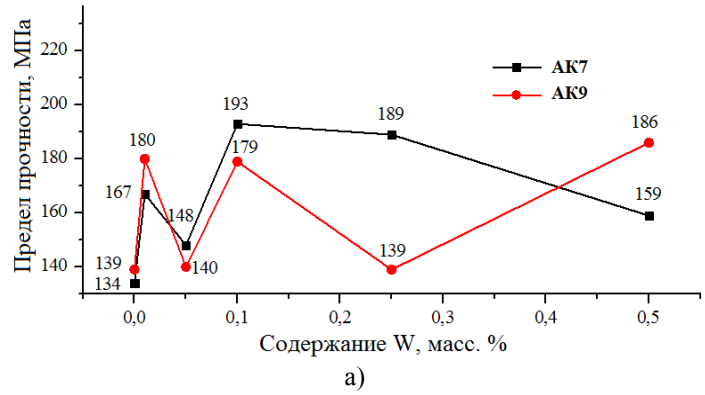


Рис. 1. Зависимости предела прочности (а), относительного удлинения (б), ударной вязкости (в) от содержания W в силуминах АК7 и АК9.

Обработка силуминов нанодисперсным порошком W приводит к повышению механических свойств, особенно предела прочности и ударной вязкости. Из рисунка 1 видно, что для сплавов АК7 и АК9 характер изменения зависимости механических свойств от содержания вольфрама практически идентичен. Введение 0,01 масс. % W в расплав силуминов приводит к повышению предела прочности на 25 % для АК7 и на 29 % для АК9 (рис. 1 а). При этом пластичность сплава АК7 увеличивается в 2 раза, а для сплава АК9 остаётся практически неизменной (рис. 1 б). В то время как для сплава АК7 ударная вязкость при введении 0,01–0,05 масс. % W остаётся неизменной, а для сплава АК12 увеличивается более чем на 30 % (рис. 1 в). Дальнейшее увеличение содержание W в силуминах приводит к неоднозначному влиянию. Оптимальным является добавка в количестве 0,1 масс. % W введение которой приводит к наибольшему значению механических свойств для сплавов АК7 и АК9 (рис. 1). При содержании 0,1 масс. %, а относительного удлинения в 1,5-2 раза.

Таким образом, в работе исследовано влияние нанодисперсного порошка W на механические свойства силуминов АК7 и АК9. Показано, что с увеличением содержания W до 0,1 масс. % происходит повышение механических свойств, а после введения 0,5 масс. % наблюдается их снижение. Установлено, что введение в расплав силуминов 0,1 масс. % W является оптимальным соотношением, так как происходит повышение предела прочности и ударной вязкости в среднем на 40 %, а относительного удлинения в 1,5-2 раза.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-38-60146 мол_а_дк.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Zeren M., Karakulak E. Influence of Ti addition on the microstructure and hardness properties of near-eutectic Al-Si alloys // Journal of Alloys and Compounds. – 2008. – Vol. 450. – P. 255–259.
2. Волочко А.Т. Модифицирование эвтектических и первичных частиц кремния в силуминах. Перспективы развития // Литье и металлургия. – 2015. – Т. 81. – № 4. – С. 38–45.
3. Eidhed W. Modification of β-Al_5FeSi Compound in Recycled Al-Si-Fe Cast Alloy by Using Sr, Mg and Cr Additions // Journal Materials Science and Technology. – 2008. – Vol. 24. – No.1. – P. 45–47.
4. Qian Z., Liu X., Zhao D., Zhang G. Effects of trace Mn addition on the elevated temperature tensile strength and microstructure of a low-iron Al–Si piston alloy // Materials Letters. – 2008. – Vol. 62. – P. 2146–2149.
5. Yuansheng R., Hong Y., Zhi H. Modification of eutectic silicon and β-Al_5FeSi phases in as-cast ADC12 alloys by using samarium addition. // Journal Rare Earths. – 2013. – Vol. 31. – No. 9. – P. 916–922.
6. Li J.H., Wang X.D., Ludwig T.H., Tsunekawa Y., Arnberg L., Jiang J.Z., Schumacher P. Modification of eutectic Si in Al-Si alloys with Eu addition // Acta Materialia. – 2015. – Vol. 84. – P.153–163.
7. Xin H., Hong Y. Effect of Trace La Addition on the Microstructure and Mechanical Property of As-cast ADC12 Al-Alloy // Journal of Wuhan University of Technology-Materials Science Education – 2013. – Vol. 28. – No. 1. – P. 202–205.
8. Сорокин Л.М., Ефименко Л.П., Калмыков А.Е., Смолин Ю.И. Электронно-микроскопическое исследование поверхностного слоя сплава алюминий-кремний после лазерного легирования карбидом вольфрама // Физика твердого тела. – 2004. – Т. 46. – №5. – С. 953–958.

СТРУКТУРНО-ФАЗОВОЕ СОСТОЯНИЕ Al-Si СПЛАВОВ ПРИ МОДИФИЦИРОВАНИИ НАНОДИСПЕРСНЫМ ПОРОШКОМ W

А.В. Чумаевский[1], Н.В. Мартюшев[2]

Научный руководитель: ст. препод., к.ф.-м.н. А.П. Зыкова[2]

[1] Институт физики прочности и материаловедения СО РАН,

Россия, г.Томск, пр. Академический, 2/4, 634055

[2] Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: zykovaap@mail.ru

PHASE COMPOSITION OF Al-Si ALLOYS SUBJECTED TO MODIFICATION BY W NANOPOWDERS

A.V. Chumaevskii[2], N.V. Martyushev[1]

Scientific Supervisor: Assist. Prof., PhD. A.P. Zykova[2]

[1] Institute of Strength Physics and Materials Science SB of RAS, Russia, Tomsk, Akademicheskii ave., 2/4, 634055

[2] Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: zykovaap@mail.ru

Abstract. *The studies of the phase-composition of Al-Si alloys subjected to modification by wolfram nanopowder during casting have been undertaken. The content of nanopowder W in an amount of 0.1 mass. % in melt silumins leads to a change of the dendrite aluminium sizes, as well as by the morphology change and the reduction of sizes of Fe-bearing phases.*

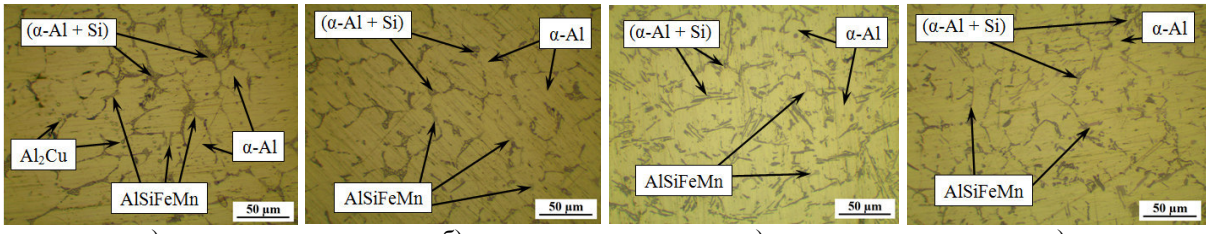
Одним из эффективных методов управления структурой и свойствами силуминов является модифицирование ультра- и нанодисперсными частицами *d*- металлов, *f*-металлов и различными соединениями на их основе [1-6]. Введение таких добавок приводит к смещению критических точек (ликвидус и солидус), что в итоге влияет на формирование и локализацию структурных составляющих силуминов. Применение модифицирующих смесей в виде нанодисперсных и ультрадисперсных порошков является более эффективным за счет большей площади активной поверхности, а сравнительно невысокая стоимость ультрадисперсных порошков и их малое количество введения в расплав (до <0,5 масс. %) делают их использование экономически более выгодным по сравнению с обычными модифицирующими лигатурами. В предыдущей работе было показано, что при введении в расплав силуминов АК7 и АК9 нанодисперсного порошка W в количестве 0,1 масс. % происходит повышение предела прочности и ударной вязкости в среднем на 40 %, а относительного удлинения в 1,5-2 раза. При этом с увеличением содержания W до 0,1 масс. % происходит повышение механических свойств, а после введения 0,5 масс. % W наблюдается их снижение. Поэтому целью работы являлось установление влияния добавок нанопорошка W в количестве 0,01–0,5 масс. % на микроструктуру и фазовый состав Al-Si сплавов.

Химический состав исследуемых сплавов АК7 и АК9 и методика модифицирования сплавов нанодисперсным порошком вольфрама представлены в предыдущей работе. Для изучения микроструктуры и фазового состава силуминов, размеров и локализации структурных составляющих

использовали оптическую микроскопию (ОМ), растровую электронную микроскопию (РЭМ) с системой рентгеновского энергодисперсионного микроанализа (РЭДМА) и рентгенофазовый анализ (РФА).

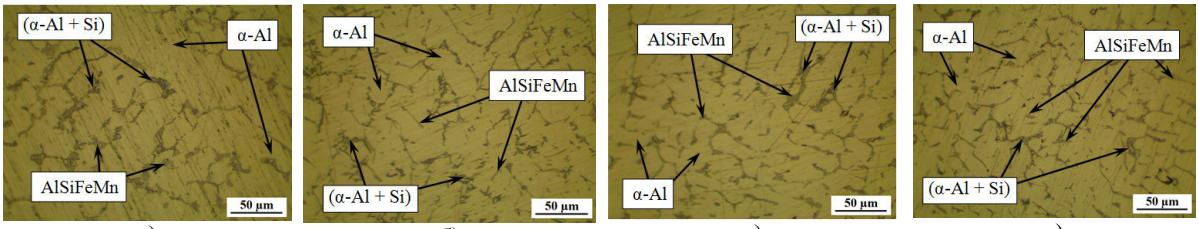
Согласно диаграмме состояния Al-W растворимость W в твердом растворе α-Al составляет 0,16-0,20 масс. % [6]. Поэтому, введенные в расплав частицы нанодисперсного порошка W в количестве 0,01-0,5 масс. % полностью растворяются в твердом растворе α-Al, не образуя дополнительных фаз.

Микроструктура исходных сплавов АК7 и АК9 состоит из твердого раствора α-Al, эвтектики (α-Al + Si + AlSiFeMn) и частиц Al_2Cu (рис. 1 и рис. 2). В структуре исходных силуминов присутствует ярко выраженная разнозернистость дендритов α-Al (рис. 1 а, рис. 2 а). Введение в расплав силуминов 0,01-0,5 масс. % W приводит к более равномерному распределению эвтектики (α-Al + Si + AlSiFeMn) и однородности дендритов α-Al.



а) б) в) г)

Рис. 1. Микроструктура сплава АК7 с различным содержанием W: а) исходное состояние; б) 0,01 масс. % W; в) 0,1 масс. % W; г) 0,5 масс. % W.



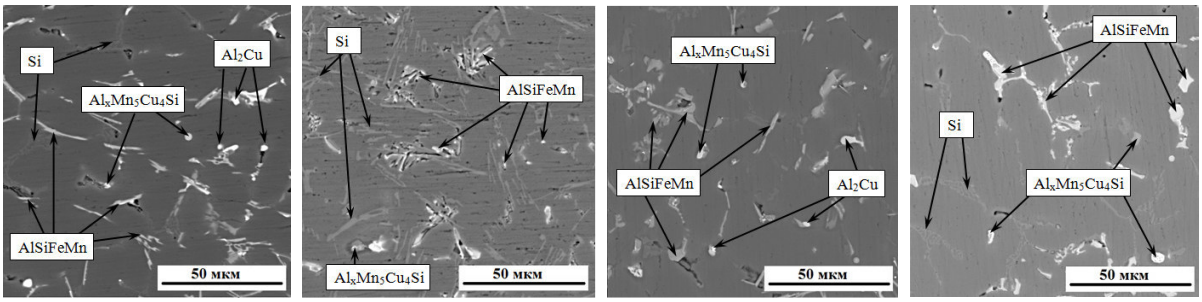
а) б) в) г)

Рис. 2. Микроструктура сплава АК9 с различным содержанием W: а) исходное состояние; б) 0,01 масс. % W; в) 0,1 масс. % W; г) 0,5 масс. % W.

Морфология эвтектического Si в исходных силуминах имеет преимущественно игольчатое строение. Ведение добавок нанодисперсного W в целом не влияет на морфологию и размер эвтектического Si (рис. 1 и рис. 2). Однако, из рис. 1 в видно, что при введении W в количестве 0,1 масс. % происходит укрупнению пластин Si, которые расположены по границам дендритов α-Al. При этом пластины кремния в эвтектике практически параллельны. Введенный в расплав АК7 нанодисперсный порошок W за счет большого количества центров кристаллизации может усиливать скорость охлаждения отливок. Известно, что при быстром охлаждении наряду с первичными дендритами алюминия образуются крупные включения Si [7].

Введение в расплав силуминов нанодисперсного W привело к изменению размеров и морфологии Fe-содержащих фаз (AlSiFeMn), и частиц фазы Al_2Cu. По данным РЭМ и РЭДМА в исходных сплавах частицы фазы Al_2Cu имеют преимущественно сферическую форму, которые локализуются на границах Fe-содержащих фаз (рис. 3 а, в). Для установления стехиометрического состава Fe-содержащих фаз требуются дополнительные исследования методом ПЭМ. Кроме того, методами РЭМ и РЭДМА обнаружена ω-фаза ($Al_xMn_5Cu_4Si$), которая выделяется в виде сферических частиц как в внутри дендритов α-Al, так и по границам эвтектики (α-Al + Si + AlSiFeMn) и хорошо просматривается в режиме

отраженных электронов (рис. 3 а, в). По данным РЭМ и РЭДМА после введения 0,1 масс.% W в сплаве АК7 происходит уменьшение размеров Fe-содержащих фаз более чем в 3 раза. В некоторых случаях фаза (AlSiFeMn) выделяется в виде отдельных частиц размером ~1 мкм (рис. 3 б). Аналогично исходному сплаву присутствует ω-фаза ($Al_xMn_5Cu_4Si$), однако в сплавах АК7 и АК9 частицы фазы Al_2Cu не обнаруживаются. В исходном сплаве АК9 Fe-содержащие фазы выделяются в виде двух модификаций: α-Fe в виде так называемой скелетообразной формы и β-Fe в виде пластин. После введения 0,1 масс.% W Fe-содержащие фазы преимущественно выделяются в форме многогранников и α-Fe.



а) б) в) г)

Рис. 3. РЭМ-изображения силуминов в режиме отраженных электронов: а) АК7 в исходном состоянии; б) АК7 + 0,1 масс. % W; в) АК9 в исходном состоянии; г) АК9 + 0,1 масс. % W.

Таким образом, при введении в расплав силуминов АК7 и АК9 нанодисперсного порошка W происходит более равномерное распределение эвтектики (α-Al + Si + AlSiFeMn), повышается однородность дендритов α-Al, а также уменьшение размеров и изменение морфологии Fe-содержащих фаз.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-38-60146 мол_а_дк.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Волочко А.Т. Модифицирование эвтектических и первичных частиц кремния в силуминах. Перспективы развития // Литье и металлургия. – 2015. – Т. 81. – № 4. – С. 38–45.
2. Eidhed W. Modification of β-Al_5FeSi Compound in Recycled Al-Si-Fe Cast Alloy by Using Sr, Mg and Cr Additions // Journal Materials Science and Technology. – 2008. – Vol. 24. – No.1. – P. 45–47.
3. Yuansheng R., Hong Y., Zhi H. Modification of eutectic silicon and β-Al_5FeSi phases in as-cast ADC12 alloys by using samarium addition. // Journal Rare Earths. – 2013. – Vol. 31. – No. 9. – P. 916–922.
4. Li J.H., Wang X.D., Ludwig T.H., Tsunekawa Y., Arnberg L., Jiang J.Z., Schumacher P. Modification of eutectic Si in Al-Si alloys with Eu addition // Acta Materialia. – 2015. – Vol. 84. – P.153–163.
5. Xin H., Hong Y. Effect of Trace La Addition on the Microstructure and Mechanical Property of As-cast ADC12 Al-Alloy // Journal of Wuhan University of Technology-Materials Science Education – 2013. – Vol. 28. – No. 1. – P. 202–205.
6. Л.Ф. Мондольфо. Структура и свойства алюминиевых сплавов // Под ред. Ф.И. Квасова, Г.Б. Строганова, И.Н. Фридляндера. – М.: Металлургия, 1979. – 640 с.
7. Мальцев М.В. Металлография промышленных металлов и сплавов. – М.: Металлургия, 2012. – 366 с.

РАЗМЕРНЫЕ ЭФФЕКТЫ В БИНАРНЫХ СПЛАВАХ СТЕХИОМЕТРИЧЕСКИХ СОСТАВОВ AB И A_3B

С.А. Шалыгин, Н.О. Солоницина, И.А. Рахманова
Научный руководитель профессор, д.т.н., Ю.С. Саркисов
Томский государственный архитектурно-строительный университет,
Россия, г. Томск, пл.Соляная, 2, 634003
E-mail: ir9039508837@yandex.ru

SIZE FACTOR IN BINARY ALLOYS WITH AB AND A_3B STOICHIOMETRIC COMPOUNDS

S.A. Shalygin, N.O. Solonitsina, I.A. Rakhmanova
Academic supervisor Professor , Dr Yu.S. Sarkisov,
Tomsk State University of Architecture and Building, Russia, Tomsk, Solyanaya Sq., 2, 634003
E-mail: ir9039508837@yandex.ru

Abstract. *The paper focuses on the formation of metallic compounds depending on the relation between several atom parameters among which is the size factor. The analysis of the binary compounds of intermetallic alloys with the simple stoichiometric compounds of AB and A_3B is presented in this paper. The block diagrams are plotted for various structures depending on the R_B/R_A size factor. Close-packed lattice structures are investigated herein.*

Введение. История изучения вопроса образования кристаллических решеток в зависимости от кристаллогеметрических параметров является длительной [1,2] и в настоящее время не потеряла своей актуальности [3,4]. Действительно, дальнейшее развитие этого подхода позволило выявить ряд принципиально новых положений [5].

В связи с этим напомним, что металлические соединения формируются в зависимости от соотношения нескольких параметров атомов. К ним относится коэффициент заполнения пространства ψ, величина сверхструктурного сжатия $\Delta\Omega$, число атомов на координационных сферах, кратчайшие расстояния между ближайшими соседями и др. Сосредоточим свое внимание на анализе кристаллогеометрических параметров таких, как размерный фактор, обычно выражаемый в соотношениях радиусов элементов R_B/R_A или $\delta=1-R_B/R_A$ [2,3].

Экспериментальная часть. Роль относительных размеров атомов при формировании структур AB и A_3B можно выявить при помощи анализа распределений различных структур от размерного фактора R_B/R_A (рис. 1, 2). Область существования структур B2 от размерного фактора R_B/R_A простирается от 0,5 до 1,0 (рис. 1 *а*). Такое представление можно сделать только при составе AB, и это связано с тем, что элементы в сплаве равнозначны. Из анализа гистограмм интерметаллидов со структурами B2 и $L1_2$ можно заключить, что они являются «универсальными» и могут существовать в широком интервале значений размерного фактора. При эквиатомном составе в ряде сплавов обнаружены орторомбические структуры типа B19 (рис. 1. *б*). Интерметаллиды с этой структурой существуют в более узком интервале размерного фактора по сравнению с универсальной структурой B2 (рис. 1. *а*). В том же интервале отношений атомных радиусов существуют интерметаллиды с тетрагональной

структуры $L1_0$ (рис. 1. *в*). В единственной двойной системе Pt-Cu при эквиатомном составе реализуется упорядоченная фаза PtCu с $L1_1$ структурой (рис. 1. *г*).

Распределение структур $L1_2$ (рис. 2 *а*) от размерного фактора R_B/R_A в силу асимметрии состава A_3B не может быть представлено только на участке от 0,5 до 1,0, как это имеет место для бинарных систем эквиатомного состава AB. Для состава A_3B распределение структур от размерного фактора занимает участок от 0,7 до 1,4. Т.е. существуют структуры, которые попадают в область значений размерного фактора, как меньше единицы, так и больше единицы (рис. 2). Видно, что основная масса структур в сплавах состава A_3B существует в области значений $R_B/R_A>1$ (за исключением структуры A15). Судя по размерному фактору, структуры состава A_3B в основном устойчивы, когда размеры атомов основного компонента больше размеров атомов не основного компонента. Распределение числа тетрагональных структур состава A_3B (рис.2 *б, в*) от размерного фактора показывает, что они могут существовать только при определенных значениях размерного фактора: от 1,0 до 1,2.

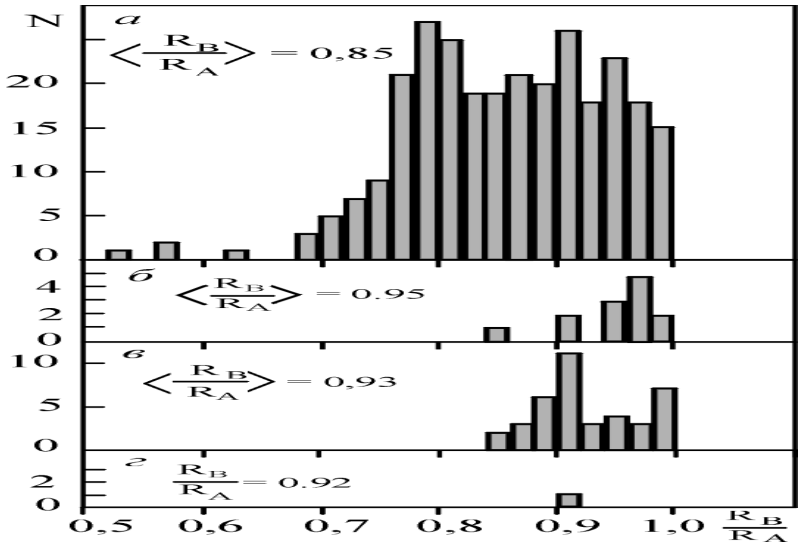


Рис. 1. Распределения в бинарных сплавах AB интерметаллических соединений со структурами B2 (а), B19 (б), $L1_0$ (в) и $L1_1$ (г) от отношения атомных радиусов элементов

На сплавы с гексагональными структурами такого строгого ограничения не накладывается. Сплавы с гексагональной сингонией могут иметь значительный разброс значений размерного фактора: от 0,8 до 1,4 (рис.2 *г, д*). Качественно вид гистограмм от размерного фактора для сплавов со структурами $L1_2$ и A15 похож. Хорошо просматриваются два вида максимумов: первого основного и второго более слабого. Причем второй слабый максимум полностью лежит в области значений размерного фактора больше единицы, как в интерметаллидах с $L1_2$, так и в A15 структурах (рис.2 *а, е*). При этом в структуре $L1_2$ выполняется основной принцип, который часто описывается в учебниках по материаловедению, что в твердых растворах лучше растворяются атомы меньших размеров, чем крупных. Это нашло отражение в том, что основное количество сплавов с $L1_2$ структурой имеет размерный фактор больше единицы. Тогда как в сплавах с A15 структурой этот принцип не всегда выполняется. Здесь, наоборот, основная масса сплавов с A15 структурой реализуется при отношении радиусов атомов R_B/R_A меньше единицы (рис. 2 *е*). Отличие в этой структуре от всех рассматриваемых структур состава A_3B состоит в том, что в ней нарушается принцип стремления атомов окружить себя только разноименными атомами в упорядоченных сверхструктурах [6].

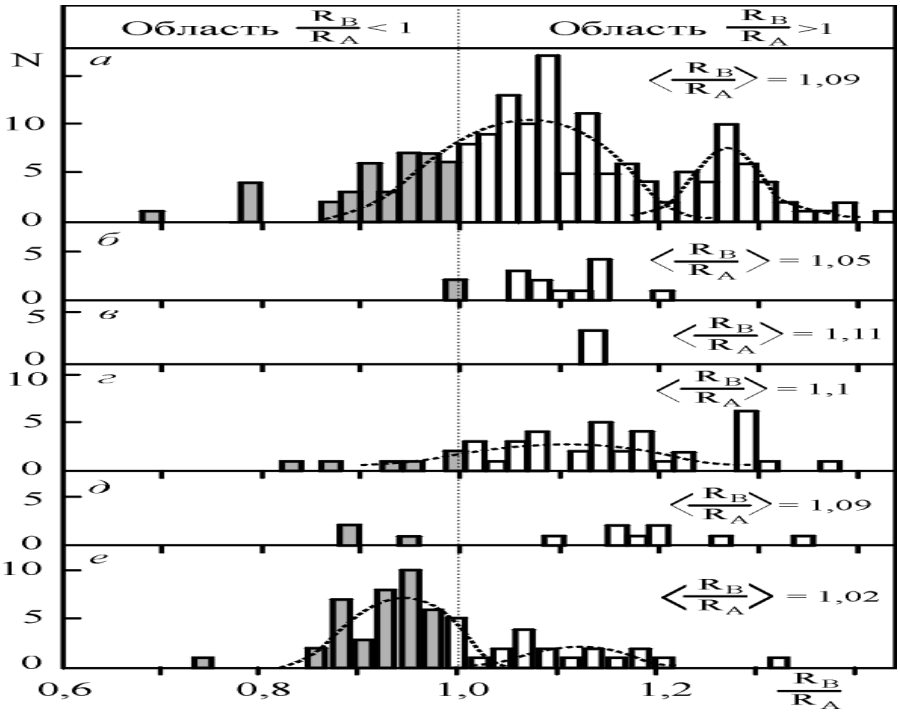


Рис. 2. Распределения в бинарных сплавах A_3B интерметаллических соединений со структурами $L1_2$ (а), $D0_{22}$ (б), $D0_{23}$ (в), $D0_{19}$ (г), $D0_{24}$ (д) и A15 (е) от отношения атомных радиусов элементов

Выводы. Проведен детальный и тщательный кристаллогеометрический анализ интерметаллидов стехиометрических составов AB и A_3B в зависимости от размерного фактора. Установлено, что область существования всех структур стехиометрического состава AB от размерного фактора R_B/R_A простирается от 0,5 до 1,0. Основная масса структур в сплавах состава A_3B существует в области значений $R_B/R_A>1$ (за исключением структуры A15).

Обнаружено, что половина сплавов структуры A15 образуется при условии R_B/R_A <1 и различие в размерах атомов не превышает 10%. Вторая половина существует при R_B/R_A >1 при значительном различии атомных радиусов, и это различие может достигать величины порядка 30%.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Агеев Н.В. Химия металлических сплавов. - М.:АН СССР, 1941. -120с.
2. Матвеева Н.М., Козлов Э.В. Упорядоченные фазы в металлических системах. - М.: Наука, 1989. – 247с.
3. Козлов Э.В., Дементьев В.М., Кормин Н.М., Штерн Д.М. Структуры и стабильность упорядоченных фаз. - Томск: ТГУ, 1994. -247с.
4. Потекаев А.И., Клопотов А.А. Козлов Э.В. и др. Слабоустойчивые предпереходные структуры в никелиде титана. - Томск: НТЛ, 2004. -296с.
5. Клопотов А.А., Солоницина Н.О., М.В. Федорищева, Козлов Э.В. Кристаллогеометрические факторы и области устойчивости соединений с σ–фазой //Сб. трудов. Упорядочение в металлах и в сплавах. 11-й международный симпозиум. Ростов н/Д . - 2008. С. 246-250.
6. Юм-Розери У. Факторы, влияющие на стабильность металлических фаз.- М. : Мир, 1970. - С.179-199.

ПОВЫШЕНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ И ТРИБОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ТЕХНИЧЕСКИ ЧИСТОГО АЛЮМИНИЯ, ПОДВЕРГНУТОГО КОМБИНИРОВАННОЙ ОБРАБОТКЕ

А.Р. Шамиева, А.Д. Тересов
Научный руководитель: профессор, д. ф.-м. н. Ю.Ф. Иванов
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050
E-mail: shamieva_nastya@mail.ru

IMPROVE THE MECHANICAL AND TRIBOLOGICAL CHARACTERISTICS OF TECHNICALLY PURE ALUMINIUM SUBJECTED TO THE COMBINED PROCESSING

A.R. Shamieva, A.D. Teresov
Scientific Supervisor: Prof., Dr. Yu.F. Ivanov
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050
E-mail: shamieva_nastya@mail.ru

Abstract. *The results are presented, received at research of phase and elemental composition, defective substructure of surface technically pure aluminium of the A7, subjected to the combined processing combining spraying metal film, electron-beam mixing of system film / substrate and subsequent nitriding in plasma of the gas discharge of low pressure. The analysis of regularities is made, revealed the modes of influence allowing multiple to raise a microhardness and wear resistance of material.*

Введение. Для повышения долговечности, надежности и стойкости деталей машин и механизмов в агрессивных средах, при трении скольжения под большими давлениями в присутствии абразивных частиц целесообразно и достаточно упрочнять лишь поверхностные слои, а не всю деталь в целом [1-3].

Алюминий и его сплавы широко используются в промышленности благодаря достаточно большой удельной прочности, удовлетворительной коррозионной стойкости и хорошей обрабатываемости механическими методами [4]. Однако наряду с этими преимуществами алюминий обладает малой твердостью и невысокой износостойкостью. Диффузное насыщение поверхности алюминия ионами азота позволяет в той или иной мере минимизировать эти недостатки [5].

Целью работы является анализ трибологических и механических характеристик технически чистого алюминия, подвергнутого комбинированной обработке.

Материал и методы исследования. В качестве модифицируемого материала использовали технически чистый алюминий марки А7 (0,16 Fe, 0,15 Si, 0,04 Zn, 0,01 Cu, 0,01 Ti, остальное Al, вес. %) [6]. Комбинированная обработка алюминия проводилась в три этапа: 1) формирование пленки сплава 12Х18Н10Т толщиной 0,5 мкм (модернизированная установка ионно-плазменного напыления «Квинта»); 2) облучение системы «пленка (сплав 12Х18Н10Т) / (А7) подложка» интенсивным импульсным электронным пучком (установка «СОЛО»); 3) азотирование модифицированной поверхности алюминия (установка ННВ-6.6-И1, дооснащенная плазмогенератором «ПИНК»), температура азотирования 540 ^{0}С, длительность азотирования 8 часов.

Результаты. Прочностные свойства поверхностного слоя технически чистого алюминия марки А7, подвергнутого комбинированной обработке, характеризовали величиной микротвердости, выявляемой методами микро- и наноиндентации (микротвердомер ПМТ-3 и нанотвердомер Nano Hardness Tester NHT-S-AX-000X). Результаты выполненных таким образом исследований представлены на рисунке 1. Отчетливо видно, что твердость модифицированных образцов максимальна на поверхности (в слое толщиной ≈ 5 мкм) и монотонно убывает по мере удаления от поверхности обработки. Твердость модифицированного слоя существенным образом зависит от режима облучения системы пленка/подложка интенсивным импульсным электронным пучком. Облучение электронным пучком с параметрами 16 кэВ, 30 Дж/см^2, 200 мкс, 0,3 с$^{-1}$, 10 имп. позволило повысить твердость образцов технически чистого алюминия марки А7 в ≈ 7 раз (рисунок 1, кривая 1).

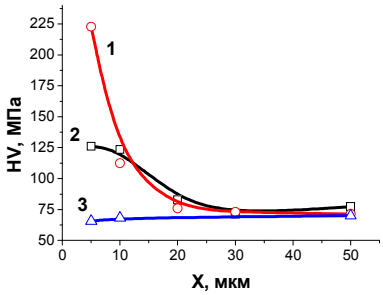


Рис. 1. Зависимость нанотвердости от расстояния до поверхности азотирования технически чистого алюминия А7: кривая 1 – напыление пленки 0,5 мкм стали 12Х18Н10Т + облучение электронным пучком (16 кэВ, 30 Дж/см^2, 200 мкс, 0,3 с$^{-1}$, 10 имп.) + азотирование в плазме газового разряда; кривая 2 – напыление пленки 0,5 мкм стали 12Х18Н10Т + облучение электронным пучком (16 кэВ, 30 Дж/см^2, 200 мкс, 0,3 с$^{-1}$, 20 имп.) + азотирование в плазме газового разряда; кривая 3 – напыление пленки 0,5 мкм стали 12Х18Н10Т + азотирование в плазме газового разряда.

Трибологические свойства модифицированного материала характеризовали параметром износа при испытаниях в условиях сухого трения. Испытания на износостойкость модифицированной поверхности проводили в геометрии диск-штифт с помощью трибометра PC-Operated High Temperature Tribometer THT-S-AX0000 (CSEM, Швейцария) при комнатной температуре. Анализ результатов, показывает, что износостойкость модифицированного слоя существенным образом зависит от режима модифицирования материала. Выявлены режимы модифицирования, позволяющие повысить износостойкость образцов технически чистого алюминия А7 в ≈ 9 раз; при этом коэффициент трения снижается в ≈ 1,3 раза. Таким режимом поверхностной обработки является следующий: напыление пленки нержавеющей стали марки 12Х18Н10Т толщиной 0,5 мкм, облучение системы «пленка (сталь 12Х18Н10Т) / (А7) подложка» высокоинтенсивным импульсным электронным пучком (16 кэВ, 30 Дж/см^2, 200 мкс, 0,3 с$^{-1}$, 20 имп.), азотирование сформированного поверхностного сплава в плазме газового разряда (температура 540 °С (8 час.), ток 120 А, напряжение 250 В, давление газа 0,9 Па).

Очевидно, что выявленные изменения прочностных и трибологических характеристик технически чистого алюминия марки А7 обусловлены преобразованием фазового и элементного состава, а также дефектной субструктуры материала.

Анализ состояния дефектной субструктуры поверхности модифицирования осуществляли методами сканирующей электронной микроскопии. Установлено, что азотирование системы «пленка (сплав 12Х18Н10Т) / (А7) подложка» приводит к формированию на поверхности модифицирования островковой структуры с размерами островков до 0,6 мкм. Размеры субструктуры островков изменяются в пределах от 50 нм до 100 нм.

Выполненные, методами рентгеноструктурного анализа, исследования фазового состава модифицированного слоя, выявили формирование многофазного состояния, представленного алюминием, нитридом алюминия AlN и α-Fe (Cr, Al) (рисунок 2).

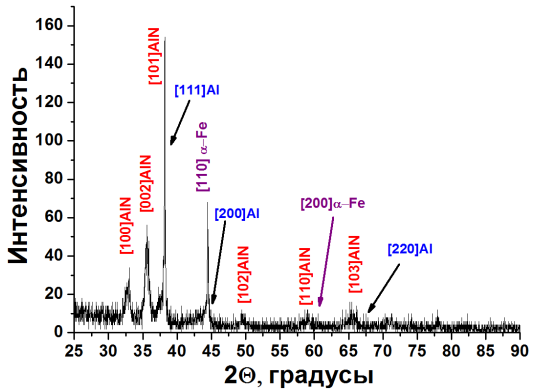


Рис. 2. Участок рентгенограммы, полученной с поверхностного слоя образцов технически чистого алюминия А7, подвергнутого комбинированной обработке.

Заключение. Таким образом, в результате выполненных исследований продемонстрирована возможность многократного увеличения трибологических и прочностных характеристик технически чистого алюминия марки А7, подвергнутого комплексному легированию поверхностного слоя путем облучения системы «пленка (сплав 12Х18Н10Т, 0,5 мкм) / (А7) подложка» интенсивным электронным пучком и последующему азотированию в плазме газового разряда низкого давления.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лахтин Ю.М. Химико-термическая обработка металлов. – М.: Металлургия, 1984. – 256 с.
2. Грибков В.А. Перспективные радиационно-пучковые технологии обработки материалов. – М.: Круглый год, 2001. – 528 с.
3. К.К. Кадыржанов, Ф.Ф. Комаров, А.Д. Погребняк, В.С. Русаков, Т.Э. Туркебаев. Ионно-лучевая и ионно-плазменная модификация материалов: Монография – М.: Изд-во МГУ, 2005. – 640 с.
4. Белов Н.А. Фазовый состав промышленных и перспективных алюминиевых сплавов. – М.: Изд-во МИСиС, 2010. – 510 с.
5. Будилов В.В., Коваль Н.Н. Интегрированные методы обработки конструкционных и инструментальных материалов с использованием тлеющих и вакуумно-дуговых разрядов. – М.: Машиностроение, 2013. – 320 с.
6. Квасов Ф.И. Промышленные алюминиевые сплавы. - Справочное издание. 2-е изд., перераб. и доп. - М.: Металлургия, 1984. - 528 с.

СПОСОБЫ ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ИМПЛАНТАТОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА

А.А. Шаронова, М.А. Сурменева
Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент Р.А .Сурменев
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, 634050
E-mail: rsurmenev@mail.ru

APPROACHES FOR SUBSTRATE FUNCTIONALISATION WITH SILVER NANOPARTICLES

A. A. Sharonova, M. A. Surmeneva
Scientific Supervisor: Associate Prof., R.A. Surmenev
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str. 30, 634050
E-mail: rsurmenev@mail.ru

Abstract. *Functionalization of titanium substrates with silver nanoparticles (AgNPs) was carried out by sessile droplet, dip-coating and EPD approaches. According the SEM results the most effective methods of surface functionalization was EPD. The PVP-stabilized AgNPs were synthesized in aqueous solutions with a diameter of the metallic core of 70 ± 20 nm, negative charge of -15 mV.*

Введение. В области стоматологии и ортопедии на сегодняшний день металлы и сплавы имеют огромную роль. Чистый титан широко используется в качестве имплантатов из-за его биологических и физико-механических свойств [1]. Общеизвестно, что имплантация постороннего объекта в организм человека может приводить к его отторжению. Кроме того, возможны проявления локальных тканевых реакций, в частности, воспаление и фиброз. Перспективным решением бактериальной активности, при дентальной имплантации, является формирование на поверхности имплантата антибактериального покрытия, которое позволит избежать отторжения и ускорить процесс лечения и восстановления [2]. В настоящее время особое внимание обращено на наночастицы серебра, они характеризуются уникальными свойствами, связанными с высоким отношением их поверхности к объему, что определяет большую эффективность их действия. Не менее интересна их функциональная активность с точки зрения придания как бактерицидных, так и бактериостатических свойств различным материалам и изделиям. Механизм воздействия серебра на микробную клетку заключается в том, что ионы серебра сорбируются клеточной оболочкой, которая выполняет защитную функцию. Клетка остается жизнеспособной, но при этом некоторые ее функции нарушаются, например, деление (бактериостатический эффект). Как только на поверхности микробной клетки сорбируется серебро, оно проникает внутрь клетки и ингибирует ферменты [3, 4]. Среди множества существующих методов, химические методы были, главным образом, использованы для создания AgНЧ. Химические методы обеспечивают простой способ синтеза AgНЧ в растворе с высокими показателями монодисперсности и высокой химической однородностью [5, 6]. Самые последние доступные методы для изготовления антибактериальных пленок включают метод погружения (окунания), электрохимическое осаждение методика нанесения на вращающуюся подложку,

метод мультислойной сборки. Приведенные методы имеют хорошую перспективу при крупномасштабном производстве формирования тонких пленок наночастиц благородных металлов [7, 8].

Экспериментальная часть. В работе рассмотрен ряд простых методов формирования серебряных покрытий, таких как нанесение покрытия осаждением из раствора (окунание), метод высушивания капли или метод сидячей капли и электрофоретическое осаждение (ЭФО). Согласно работе [9], AgНЧ были синтезированы в водном растворе, стабилизированы с поливинилпирролидоном (PVP), имеют диаметр металлической оболочки 70 ± 20 нм и отрицательный заряд -15 мВ. Титановые образцы покрывали наночастицами серебра тремя методами: 1. Метод сидячей капли - процесс, основан на формировании капли 120 мкл водного раствора с концентрацией AgНЧ 60 мкг мл$^{-1}$ и последующей сушкой при 55,5 °С. 2. Осаждение из раствора - образец погружали в 5 мл водного раствора НЧ с той же концентрацией и выдерживали в течение 24 часов с последующей сушкой при 55,5 °С. 3. Электрофоретическое осаждение - осаждение достигалось за счет движения отрицательно заряженных AgНЧ, диспергированных в рабочем растворе, к электроду под приложенным электрическим полем. Для электрофоретического осаждения были приготовлены два типа рабочих растворов. Первый раствор с дистиллированной водой, а второй на основе абсолютного этанола, концентрация AgНЧ в растворах составляла 60 мкг мл$^{-1}$. На рисунке 1 показаны результаты функционализации титановой подложки с помощью AgNP.

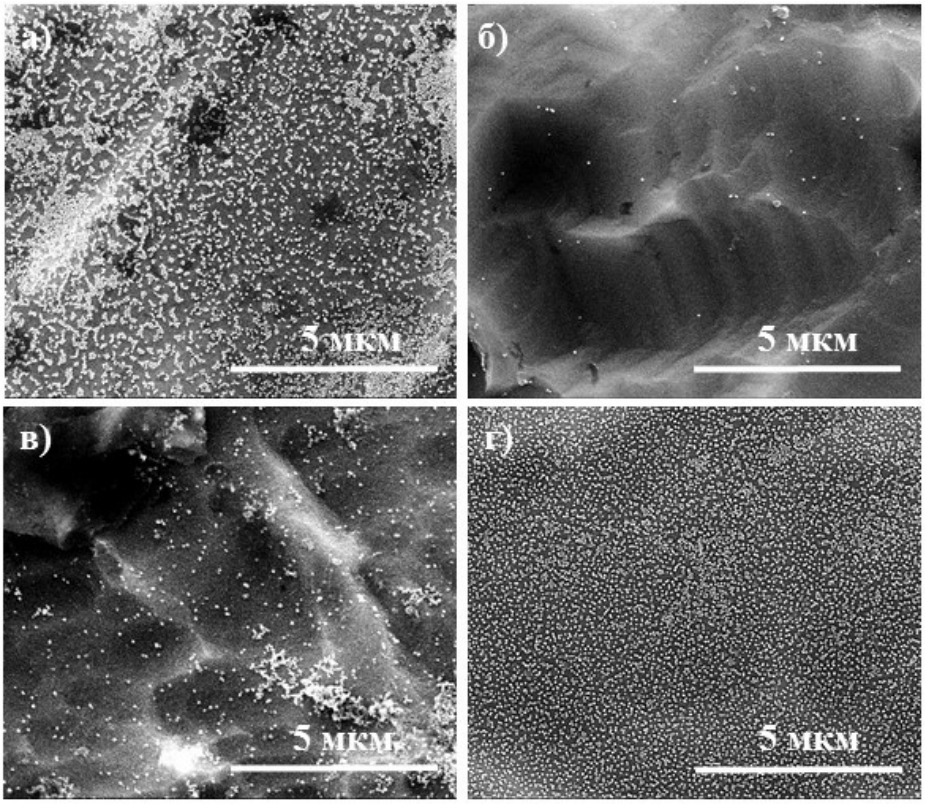


Рис. 1. Титановые образцы, функционализированные AgНЧ с PVP: a) метод сидячей капли 120 мкл, b) осаждение из раствора, c) ЭФО в воде (3 В, 60 мин), d) ЭФО в этаноле (50 В, 30 мин). Концентрация рабочего раствора составляла 60 мкг мл$^{-1}$ в каждом эксперименте.

Результаты исследования. Результаты сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) (рис.1) показали наличие сферической формы AgНЧ и их равномерное распределение по поверхности

титанового образца в случае использования метода ЭФО. Недостаток метода сидячей капли связан с поверхностным натяжением, и, как следствие, образцы не полностью покрыты частицами, а также наблюдаются островки с агломерацией НЧ. Также в случае практического применения метод сидячей капли имеет недостаток, связанный с процессом формирования покрытия на сложных конструкциях имплантатов. Методы окунания и ЭФО из водного раствора показали низкою концентрацию НЧ на поверхности образцов, а также обнаружены островковые агломерации НЧ.

Заключение. Функционализация поверхности титановых подложек с помощью AgНЧ осуществлялась методом сидячей капли, осаждением из раствора и ЭФО. Стабилизированные с PVP AgNP синтезировали в водных растворах. AgНЧ имеют диаметр металлической оболочки 70 ± 20 нм и отрицательный заряд -15 мВ. Эффективным методом для дальнейшей работы является ЭФО. Данная методика позволяет формировать равномерное покрытие на основе AgНЧ и имеет большие перспективы использования в производственных масштабах.

Работа выполнена при поддержке стипендии Президента Российской Федерации (СП-444.2016.4) и российского научного фонда (15-13-00043). Авторы выражают благодарность проф. М. Эппле, др. К. Лозе и др. О. Примаку (университет Дуйсбург-Эссен).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hanawa T. (2010) Biofunctionalization of titanium for dental implant. Japanese Dental Science Review, vol. 46, no. 2, pp. 93–101.
2. 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.
3. Gupta K., Singh R. P., & Pandey A. (2013) Photocatalytic antibacterial performance of TiO_2 and Ag-doped TiO_2 against S. aureus. P. aeruginosa and E. coli. Beilstein Journal of Nanotechnology, no 4, pp. 345–351.
4. Ketonis C., Parvizi J., & Jones L. C. (2012) Evolving Strategies To Prevent Implant-associated Infections. JAAOS, no. 20, pp. 478–80.
5. Chen S., & Zhang H., (2012) Aggregation kinetics of nanosilver in different water conditions. Adv. Nat. Sci.: Nanosci. Nanotechnol, no. 3, p. 035006.
6. Dang T. M. D., Le T. T. T., Fribourg-Blanc E., et al.. (2012) Influence of surfactant on the preparation of silver nanoparticles by polyol method. Adv. Nat. Sci.: Nanosci. Nanotechnol, no. 3 p. 035004.
7. Zhang X. Y., Hu A., Zhang T., Lei W., Xue X. J., Zhou Y., & Duley W. W. (2011) Self-assembly of large-scale and ultrathin silver nanoplate films with tunable plasmon resonance properties. ACS Nano, no. 5, pp. 9082–9092.
8. Liang C., Zhong K., Liu M., Jiang L., Liu S., Xing D., Li H., Na Y., Zhao W., et. al. (2010) Synthesis of morphology-controlled silver nanostructures by electrodeposition. Nano-Micro Lett, no. 2, pp. 6–10.
9. 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.

ПРЕИМУЩЕСТВЕННАЯ ОРИЕНТАЦИЯ И ДЕФЕКТНОЕ СТРОЕНИЕ γ′- ФАЗЫ В СПЛАВЕ НА ОСНОВЕ Ni-Al-Cr, ЛЕГИРОВАННОГО ЛАНТАНОМ

Л.Ф. Шергаева, Н.А. Попова, Н.Р. Сизоненко, Е.Л. Никоненко
Научный руководитель: доцент, к.ф.-м.н. Е.Л. Никоненко
Томский государственный архитектурно-строительный университет,
Россия, Томск, пл.Соляная, 2, 634003
E-mail: vilatomsk@mail.ru

PREFERRED ORIENTATION AND THE DEFECT STRUCTURE γ′-PHASES IN ALLOY ON THE BASIS OF NI-AL-CR ALLOYED BY THE LANTHANUM

L.F. Shergaeva, N.A. Popova, N.R. Sizonenko, E.L. Nikonenko
Scientific Supervisor: senior Researcher E.L. Nikonenko
Tomsk State University of Architecture and Building, Russia, Tomsk
Tomsk State University of Architecture and Building, Soljanaja str. 2, Tomsk 634003, Russia
E-mail: vilatomsk@mail.ru

Abstract. *Methods of the diffraction submicroscopy on thin folga conducted a research of slozhnolegirovanny superalloy on the basis of Ni-Al-Sr prepared with method of a directional crystallization containing, by γ′-and γ phase. It is established that introduction to alloy of a lanthanum changes preferred orientation of γ′ - phase. Annealing of the alloy alloyed by a lanthanum leads to scattering of texture.*

Введение. В суперсплавах, содержащих (γ+γ′)-фазы, как правило, между γ- и γ′-фазами имеется полное ориентационное соответствие. Одним из способов получения таких сплавов является метод направленной кристаллизации. Можно ожидать, что изготовленный таким способом суперсплав должен обладать хорошо организованной текстурой [001]. Однако введение большого количества разнообразных легирующих элементов, в том числе лантана, а также отжиг суперсплава могут изменить его текстуру. Исследованию этого вопроса и посвящена настоящая работа.

Материал и методы исследования. Состав суперсплава образован следующими элементами: 70,84…71,0 ат.%Ni, 17,0…17,08 ат.%Al, 5,73…5,74 ат.%Cr, 1,98 ат.%Mo, 1,7 ат.%Ti, 0,88 ат.%W. Дополнительно вводился лантан в трех различных концентрациях: 0.015; 0.10 и 0.30 вес.%.

Исследуемые образцы сплава были получены в результате направленной кристаллизации. Затем образцы подвергались отжигу при температуре 1273 К и выдержках в течение 10 и 25 часов. Основными методами исследования являлись метод дифракционной электронной микроскопии (ПЭМ) на тонких фольгах и рентгеноструктурный анализ.

Результаты и их обсуждение. Исследуемый сплав в общем случае состоит из шести фаз. Основной фазой является γ′-фаза. Присутствуют в сплаве лантаниды La_2Ni_3 и Al_2La. Еще одна фаза, которая обозначена как α_2-фаза. Помимо этих фаз в небольших количествах наблюдаются частицы карбида La_2C_3, расположенные на дислокациях в γ′-фазе. Содержание этих фаз в сплаве зависит от концентрации лантана и термической обработки сплава, но их присутствие сохраняется во всех случаях.

γ-фаза присутствует во всех случаях кроме предельной термообработки – отжиге при T = 1273 K в течение 25 часов.

Рассмотрим преимущественную ориентацию γ′-фазы, т.е. текстуру. Отжиг сплава при 1000^0C сильно усложняет текстуру сплава. В таком же направлении влияет увеличение концентрации лантана. Это подтверждает, что содержание лантана и образование лантанидов влияет на морфологию и дефектную структуру γ′-фазы. Прежде всего, рассмотрим текстуру. В исходном состоянии (неотожженном) при малой концентрации лантана присутствуют две ориентировки: [001] и [112] (рис.1а-в), причем первая ориентация встречается вдвое чаще, чем вторая.

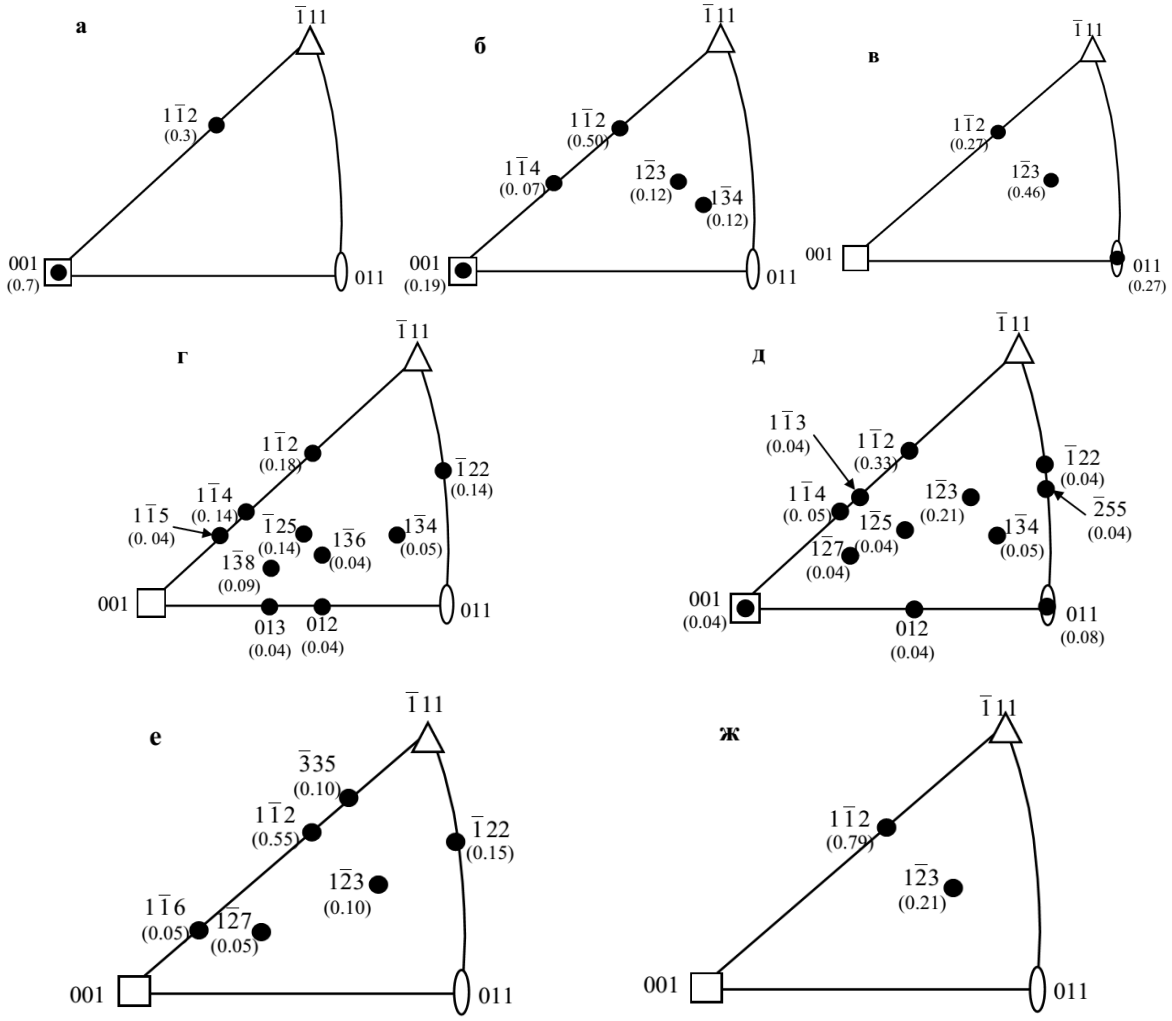


Рис.1. Изменение текстуры при изменении (а-в) концентрации лантана (C_{La}) в неотожженном сплаве (а –0.015 вес.%; б – 0.1 вес.%; в – 0.3 вес.%;(г-д) продолжительности отжига t при 1000^0C C_{La} = 0.1 вес.%: г – 10 часов; в – 25 часов; продолжительности отжига t при 1000^0C C_{La} = 0.3 вес.%: е – t = 10 часов; ж – t = 25 часов (в скобках указаны объемные доли присутствующих ориентаций)

С ростом концентрации лантана роль ориентировки [001] быстро убывает, и она заменяется ориентировками вдоль биссектрисы треугольника 112 – 011. Совершенно очевидно, что введение лантана подавляет формирование кубической ориентации. В таком же направлении действует отжиг при температуре 1000^0C: сначала наблюдается рассеяние текстуры, а затем консолидация текстуры вдоль направления [112] – [011] (рис.1г-ж).

Отжиг слабо влияет на величину скалярной плотности дислокаций γ′-фазы. Она остается высокой. Как показали проведенные измерения, изменения скалярной плотности дислокаций близки к значению дисперсии её величины (рис.2а). Дифракционный анализ показывает, что большая часть дислокаций в γ′-фазе залегает в положениях дислокационных барьеров, типичных для ГЦК решетки. Чаще всего это барьеры Кира-Вильсдорфа.

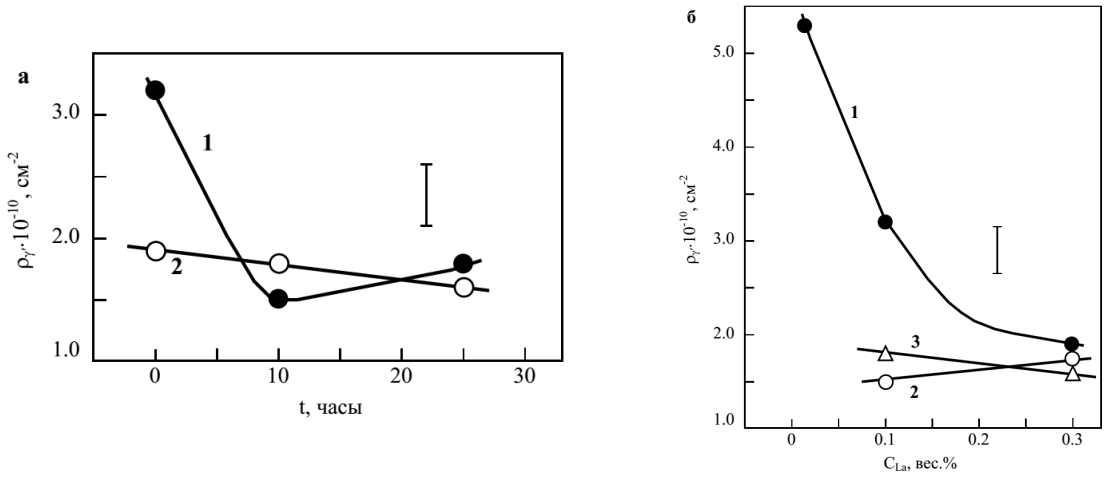


Рис.2. Изменение скалярной плотности дислокаций $\rho_{\gamma'}$ в γ′-фазе в отожженном при T = 1000^{0}C в сплаве а - от продолжительности отжига t (концентрация лантана составляет: 1 –0.1 вес.%; 2 – 0.3 вес.%); б - от концентрации лантана C_{La}. (продолжительность отжига составляет: 1 – t = 0; 2 – 10 часов; 3 – 25 часов)

Влияние концентрации лантана на величину ρ существенно только в исходном состоянии сплава (рис.2б, кр.1). В отожженном состоянии зависимость величины ρ от концентрации лантана невелика (рис.2б, кр.2-3). Таким образом, подтверждается мнение о том, что лантан прежде всего осложняет рост совершенных кристаллов при кристаллизации суперсплава.

Сопоставление данных о скалярной плотности дислокаций ρ и неоднородности твердого раствора γ′-фазы, характеризуемые величиной Δd (см. рис.3), свидетельствует о следующем.

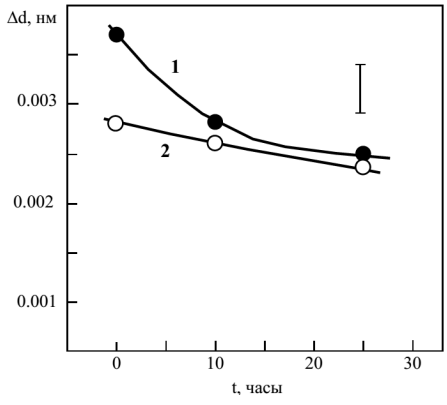


Рис.3. Изменение полуширины линии (111) от продолжительности отжига t в исследуемом сплаве 1 – C_{La} = 0.1 вес.%; 2 - C_{La} = 0.3 вес.%

Во-первых, имеет место значительная неоднородность γ′-фазы. Во-вторых, наблюдается корреляция между степенью неоднородности твердого раствора и скалярной плотностью дислокаций в γ′-фазе. В-третьих, исследования показали, что неоднородность твердого раствора γ′-фазы является причиной появления в ней высокой плотности дислокаций.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ЛЕСНЫХ ГОРЮЧИХ МАТЕРИАЛОВ ПРИ ОЦЕНКЕ СКОРОСТИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ИМПУЛЬСА ТЕПЛА В ТОЛЩЕ ОБРАЗЦА

Н.Е. Шлегель, Т.Р. Валиуллин, В.А. Кириенко

Научный руководитель: к.ф.-м.н. А.О. Жданова

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: nik.shlegel.ask@gmail.com

DETERMINATION OF FOREST COMBUSTIBLE MATERIALS THERMOPHYSICAL PROPERTIES AT ESTIMATION OF HEAT IMPULSE DISTRIBUTION SPEED IN SAMPLE THICKNES

N.E. Schlegel, T.R. Valiullin, V.A. Kiriyenko

Scientific Supervisor: Phd. A.O. Zhdanova

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

E-mail: nik.shlegel.ask@gmail.com

Abstract. *Experimental studies to determine the thermophysical properties (thermal conductivity, specific heat) of forest combustible materials were made. Typical materials of the softwood and deciduous forests of Tomsk region geographic latitudes were used as samples. Scales of temperature influence on thermophysical properties of a forest cover were determined. The comparative analysis of the received values of thermophysical characteristics for pine needles of and birch leaves of the boreal massif with earlier published results was carried out. 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 являются источником колоссальных экологических и экономических проблем [1]. Низовые пожары, как известно, являются основной причиной распространения фронта горения по бореальному массиву. При этом важной составляющей в условиях возгорания надпочвенного покрова является химия стадий деструкции ЛГМ [2], а также кинетика пиролиза горючего материала [3]. Опубликовано недостаточно данных по влиянию теплофизических свойств лесных горючих материалов (ЛГМ) на процесс прекращения его термического разложения в условиях температур, сопоставимых с реальными при низовом пожаре. Целью настоящей работы является определение теплофизических свойств типичных лесных горючих материалов Томской области в характерном для низового пожаре диапазоне температур.

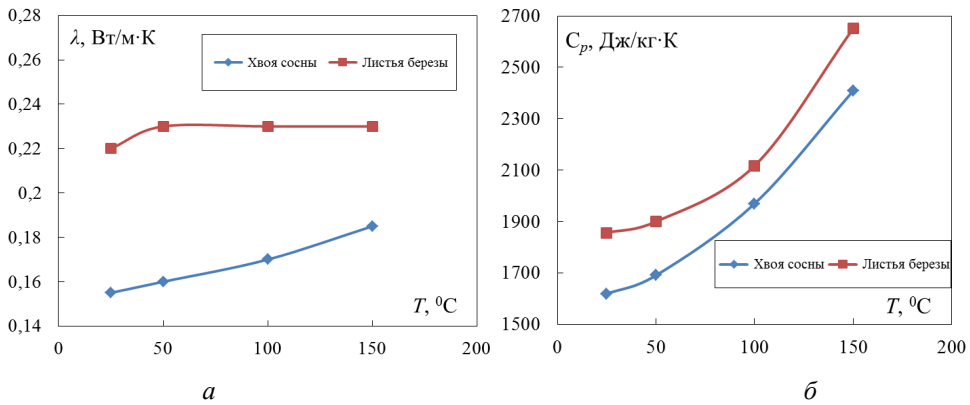
Материалы и методы исследования. Исследуемые образцы были собраны на территории города Томска и Томской области (п. Самусь). Для измерения теплофизических характеристик ЛГМ использовалась система DLA-1200 TA Instruments (рис. 1), принцип действия которой основан на оценке скорости распространения импульса тепла в толще образца. Систематическая погрешность определения коэффициентов теплоемкости составляет – ±4%, теплопроводности – ±5%.

Рис. 1. Схема установки для определения теплофизических характеристик веществ

Подготавливалась навеска порошков (средний размер частиц составил около 200 мкм), исследуемых материалов массой около 0,15–0,27 г, и при помощи гидравлического пресса навески спрессовывались в образцы цилиндрической формы. Образцы при помощи держателя и специализированной тележки помещались в термостат. Рабочий объем термостата заполняется инертным газом (азотом).

Для проведения измерений обязательно наличие калибровочного образца, загружаемого в модуль термостата одновременно с тестируемыми образцами. В качестве калибровочного образца использовался Pyrex7740 с известными теплофизическими характеристиками. Значения коэффициентов теплопроводности и температуропроводности, удельная теплоемкость определяются при помощи программного обеспечения системы DLA-1200 TA Instruments на основе скорости распространения импульса лазерного излучателя в толще образца. Единовременно в термостат загружались калибровочный образец и 3 образца ЛГМ одного типа. Для каждого образца проводилось 5 измерений, результаты которых усреднялись. Для готовых образцов перед помещением в термостат определяются масса, высота, диаметр основания и плотность. Эти данные заносятся в программное обеспечение системы DLA-1200 TA Instruments.

Результаты. На рисунке 2 представлены полученные в результате экспериментальных исследований значения теплофизических характеристик в диапазоне температур от 25 до 150 ^{0}C для листьев березы и хвои сосны.



а *б*

Рис. 2. Зависимость коэффициента теплопроводности (а), удельной теплоемкости (б) образцов хвои сосны и листьев березы от температуры

Заметен (рис. 2) существенный рост удельной теплоемкости, рассмотренных ЛГМ, при увеличении температуры. Анализ опубликованной литературы позволил установить удовлетворительную корреляцию полученных значений теплофизических характеристик. В таблице 1 приведены известные экспериментальные значения коэффициентов теплопроводности и удельной теплоемкости типичных материалов напочвенного покрова смешанных лесов [4–5].

Таблица 1

Теплофизические характеристики ЛГМ

ЛГМ	T, ^{0}C	*w*, %	λ, Вт/(м·К)	C_p, Дж/(кг·К)
Опад хвои [4]	25–30	10–50	0,05–0,1	1300–2500
Опад хвои [5]	30-90	0	0,102±0,0035	1397±0,550
Экспериментальные значения опада сосны	25–150	4,46	0,15–1,18	1618–2409
Опад листьев осины [5]	30-90	0	0,1340±0,0046	1450±0,11
Экспериментальные значения опада листьев березы	25–150	4,38	0,22–0,23	1856–2651

Заключение. Полученные значения могут быть использованы для численного моделирования процессов деструкции ЛГМ в условиях соответствующих реальным пожарам лесного массива.

Исследования выполнены за счет средств гранта Российского научного фонда (проект 14-39-00003) и при поддержке гранта Президента РФ (МК-1684.2017.8).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Атлас риска пожаров на территории Российской Федерации – М.: ООО «Издательско-продюсерский центр» «Дизайн. Информация. Картография», 2010. – 640 с.
2. 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.
3. Палецкий А.А., Гончикжапов М.Б., Коробейничев О.П. Исследование пиролиза лесных горючих материалов методом зондовой молекулярно-пучковой масс-спектрометрии // Сиббезопасность-Спассиб. – 2011. – № 1. – С. 97-98.
4. Соболь В.Р., Гоман П.Н., Дедюля И.В., Бровка А.Г., Мазуренко О.Н., Тепловые свойства напочвенного материала леса при характерном содержании влаги // Инженерно-физический журнал. – 2011. – Т. 84, №5. – С. 1079–1087.
5. Гришин А.М., Математические модели лесных пожаров, Томск. – 1981. 277 с.

ВЫХОД ВОДОРОДА ИЗ МЕТАЛЛОВ ПРИ ТЕРМИЧЕСКОМ И РАДИАЦИОННОМ НАГРЕВЕ

Юань Цзэюй, В.С. Сыпченко, Н.Д. Толмачева

Научный руководитель: профессор, д.ф-м.н. Ю.И. Тюрин

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: 550162525@qq.com

RELEASE OF HYDROGEN FROM METALS UNDER THERMAL AND RADIATION HEATING

Yuan Zeyu, V.S. Sypchenko, N.D. Tolmacheva

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

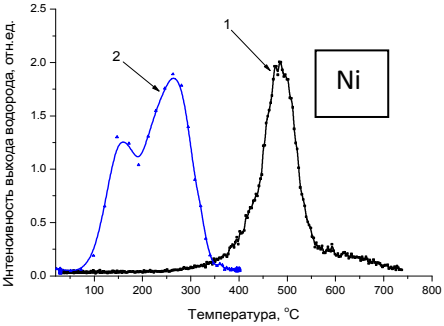
E-mail:550162525@qq.com

Abstract. *In the present study, we performed the release of hydrogen from metals under the effect of thermal stimulation and influence of electron beam for the release of hydrogen. We find that temperature of the maximal release of hydrogen exists in the process of experimental and the difference between ТСГВ and РСГВ.*

Введение. Возобновляемая водородная энергетика представляет экологически чистый и эффективный источник энергии. .Изучение закономерностей выхода водорода из металлов, позволяет использовать водородную энергию более эффективно и безопасно.В этом эксперименте исследовано положение (температура) максимума выхода водорода при термостимулированном (ТСГВ) и радиационностимулированном (РСГВ) газовыделении.Метод РСГВ позволяет существенно снизить температуру выхода водорода из металлов.

Методика эксперимента. Изучение миграции, диффузии и выхода изотопов водорода из металлов под действием ускоренных электронов осуществлялось методом масс-спектрометрии in situ на высоковакуумной (Рост< 10-5 Па) установке с безмаслянной откачкой [1]. Для стимуляции выхода изотопов водорода применялся электронный пучок с энергией 35 КэВ, плотность тока пучка 75 мкА/см^2.Металлы водородом насыщались электролитически в 0.1 н растворе H_2SO_4 при токах 0,02-0,04 А/см^2 в течение 20-48 часов. Исследуемые образцы в вакуумной ячейке размещали на изолирующей керамической подложке. Температуру образцов измеряли термопарой на лицевой и тыльной сторонах образца.

На рис 2,3 представлены скорости выхода дейтерия из никеля, палладия в случае термического (ТСГВ) линейного нагрева со скоростью 1,0 К/с (кривые 1) и радиационного нагрева электронным пучком (кривые 2) со скоростью 10 К/с. Увеличение скорости нагрева способствует сдвигу максимума на кривых газовыделения в более высокотемпературную область.



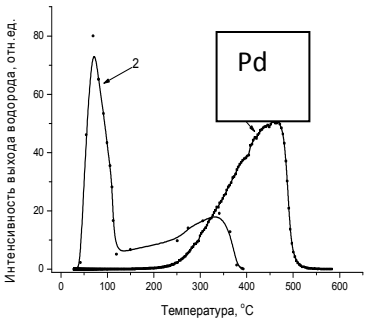


Рис.2. Термостимулированный (1) и радиационностимулированный (2) выход водорода из никеля. Сдвиг РСГВ по сравнению с ТСГВ ΔTNi=350-250 0C

Рис.3. Термостимулированный (1) и радиационностимулированный (2) выход водорода из паладия. Сдвиг РСГВ по сравнению с ТСГВ ΔTPd>3800C

Величина энергии активации выхода водорода для линейного нагрева образца может быть определена по формуле Редхеда [2]:

$$E_d = kT_{\max}(\ln\frac{\nu_1 T_{\max}}{\beta} - 3{,}64),$$

где β - скорость нагрева, $\nu_1 \sim 10^{13}c^{-1}$ –частотный фактор десорбции. В таблице приведены результаты расчета выхода энергий активации десорбции водорода при линейном термическом нагреве со скоростью ~1 К/с и линейном нагреве образца электронным пучком со скоростью ~10 К/с.

Таблица1

Параметры спектров ТСГВ и РСГВ

Образец	β(ТСГВ), К/с	$T_{\max}$ (ТСГВ),К	E_d (ТСГВ),эВ	β(РСГВ), К/с	$T_{\max}$ (РСГВ),К	E_d (РСГВ),эВ
Ni	1	773	2,5	10	423,548	1,3;1,7
Pd	1	753	2,3	10	363	1,1

Результаты. Полученные результаты показывают, что при нагреве образца электронным пучком десорбция водорода происходит с эффективной энергией активации в 1,5-2 раза меньшей чем при ТСГВ. Указанное различие может быть связано с неравновесным характером десорбции десорбции водорода в условиях радиационного воздействия [3,4]. Облучение насыщенных водородом материалов, например электронами, поглощаемыми в слое толщиной Lex, сопровождается генерацией в водородной подсистеме металла колебательно-возбужденных состояний со скоростью Гех. Если учесть, что степень насыщения металлов водородом велика и соответствует в Pd примерно одному атому H(D) на атом металла, то энергия колебаний в водородной подсистеме (частота с которой колеблются ионы водорода, будучи смещены относительно ионной подрешётки металла):

$$\hbar\omega = \hbar e\sqrt{\frac{\rho_{Pd}N_A}{\mu_{Pd}m_p\varepsilon_0}} = \hbar e\sqrt{\frac{n_H}{m_p\varepsilon_0}} \cong 0{,}2эВ,$$

где ρ_{Pd}, ρ_{Pd} - плотность и молярная масса палладия; mp - масса протона; NA - число Авогадро; ε_0 - электрическая постоянная. Это соответствует частоте колебаний в металлах H^+: $5 \cdot 10^{13}$ c^{-1} .

Заключение. Определены скорости выхода водорода из никеля и палладия в случае термического (ТСГВ) линейного нагрева со скоростью 1,0 К/с и радиационного нагрева электронным пучком со скоростью 10 К/с. Хотя увеличение скорости нагрева должно способствовать сдвигу максимума на кривых газовыделения в более высокотемпературную область, экспериментально наблюдается существенный сдвиг максимумов термогазовыделения при радиационном нагреве в низкотемпературную область на 250-300 градусов и понижение энергии активации выхода при РСГВ в 1,5-2 раза.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. N. N. Nikitenkov, A. M. Hashhash, I. A. Shulepov, V. D. Khoruzhii, Yu. I. Tyurin, I. P. Chernov, and E. N. Kudryavtseva 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 Technicues of Surface Science, 2 ed, Cambridge University Press, 1994, 586 p.)
3. Yu. Tyurin and I. Chernov, Non-equilibrium release of atomic hydrogen from metals under irradiation, Int. J. Hydrogen Energy 27(2002) 829□835.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, Vacuum
4. Yu. Tyurin and I. Chernov, Non-equilibrium release of atomic hydrogen from metals under irradiation, Int. J. Hydrogen Energy 27(2002) 829□835.
5. I.P. Chernov, A.S. Rusetsky, D.N. Krasnov, V.V. Larionov, T.I. Sigfusson, Yu.I. Tyurin, Radiation-stimulated hydrogen transfer in metals and alloys, Journ. of Engin.Thermophys., 20(4) (2011) 360-379.

ДОЗИМЕТРИЯ НЕЙТРОННЫХ ПОЛЕЙ ТЕРАПЕВТИЧЕСКОГО КОМПЛЕКСА НА БАЗЕ ЦИКЛОТРОНА У-120

А.Д. Южаков

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

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: alx-142@yandex.ru

THE DOSIMETRY OF NEUTRON FIELDS OF THERAPEUTIC COMPLEX BASED ON THE U-120 CYCLOTRON

A.D. Yuzhakov

Scientific Supervisor: candidate of Physical and Mathematical Sciences, A.R. Vagner

National Research Tomsk Polytechnic University,

Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: alx-142@yandex.ru

Abstract. *In this work, the characteristics of the treat beam's dosimetry of fast neutrons of the U-120 cyclotron have been analyzed with the help of the ionizing method. The fast neutrons with 6, 3 MeV as medium energy have been obtained in coordination of deuterons with the target made of beryllium and are meant to be used for treating the patients with malignant neoplasms. The capacity of the dose in the beam of fast neutrons has been measured by ionization chambers of different types. The research has been done with the consideration of co-occurring gamma rays. The monitoring indices needed for calculation the duration of therapy session at given therapy dose have also been specified.*

Введение. В данной работе были исследованы характеристики терапевтического пучка быстрых нейтронов циклотрона У-120 с помощью ионизационного метода. Быстрые нейтроны со средней энергией 6, 3 МэВ, применяемые для лечения пациентов со злокачественными новообразованиями, были получены при взаимодействии дейтронов с мишенью из бериллия. Мощность дозы в пучке быстрых нейтронов была измерена ионизационными камерами различного типа. Исследования проводились с учетом сопутствующего гамма-излучения. Кроме того, были определены мониторные коэффициенты, необходимые для расчета продолжительности сеанса терапии при заданной терапевтической дозе.

Актуальность. В настоящее время, источники ионизирующих излучений широко применяются во многих областях науки и техники. Одной из областей, в которой они нашли широкое применение, является лучевая терапия злокачественных новообразований. Плотноионизирующее излучение, в частности, быстрые нейтроны, эффективно используют для лечения пациентов с радиорезистентными злокачественными опухолями [1-3]. Одним из важнейших факторов, обеспечивающих проведение нейтронной терапии, является адекватное дозиметрическое сопровождение метода. Оно является основой для разработки компьютерных программ планирования режимов облучения в нейтронной терапии [4]. Проведение дозиметрического контроля нейтронного излучения осложняется тем, что нейтронный поток в большинстве случаев сопровождается сопутствующим гамма-излучением. Несмотря на то, что нейтронная терапия проводится уже много лет, всё ещё существует необходимость получения более обширной дозиметрической информации о характеристиках терапевтических нейтронных пучков с целью совершенствования методов нейтронной терапии. По этой причине, дозиметрические

исследования характеристик нейтронных пучков, применяемых для терапии онкологических больных, являются актуальными.

Материалы и методы. В Томском НИИ онкологии нейтронную терапию проводят на циклотроне У-120 Национального исследовательского Томского политехнического университета. Терапевтический пучок быстрых нейтронов получен посредством бомбардировки бериллиевой мишени дейтронами с энергией 15 МэВ:

$$d_1^2 + Be_4^9 \rightarrow Be_5^{10} + n_0^1$$

Формирование пучка нейтронов осуществляется посредством специального коллиматора, устройство которого показано на рис. 1. Бериллиевая мишень расположена со стороны машинного зала в бетонной стене, которая отделяет процедурное помещение от циклотронного зала. Для формирования прямоугольных полей облучения различных размеров в коллиматоре применяются взаимозаменяемые вставки из полиэтилена. Они позволяют формировать поля размерами от 6x6 см^2 до 15x15 см^2. Генерируемый терапевтический нейтронный пучок направлен горизонтально.

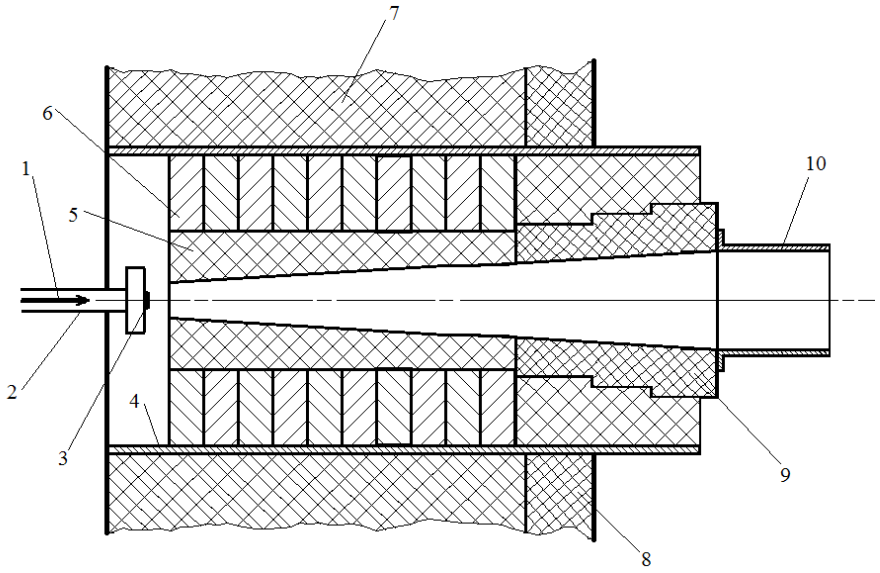


Рис. 1. Устройство для формирования нейтронных полей облучения: 1 - пучок дейтронов; 2 - ионопровод; 3 - мишень; 4 - стальная труба; 5 - полиэтиленовый коллиматор; 6 - стальные диски; 7 - бетонная стена; 8- полиэтиленовая защита; 9- сменные полиэтиленовые вставки; 10- тубус.

Сопутствующее гамма-излучение образуется в ядерных реакциях при взаимодействии нейтронов с конструкционными элементами формирующего устройства и биологической тканью. В связи с этим, дозиметрические характеристики радиационного поля, в котором находится пациент во время сеанса терапии, были исследованы с помощью ионизационного метода, позволяющего измерить дозы нейтронного и гамма-излучения в отдельности. Данный метод основан на использовании двух ионизационных камер, обладающих различной чувствительностью к нейтронам. Камера, обладающая высокой чувствительностью, изготовлена из полиэтилена, а камера, обладающая низкой чувствительностью – из графита. Камеры были прокалиброваны на пучке гамма-излучения аппарата «Theratron», аттестованном поверочной лабораторией, с применением дозиметра «Dose-1», также имеющего Свидетельство об аттестации. В течение сеанса терапии интенсивность нейтронного пучка может изменяться. В связи с этим, продолжительность сеансов терапии контролируется не по времени, а

согласно показаниям дозиметра – монитора. Для осуществления такого контроля в дозиметрических исследованиях были определены мониторные коэффициенты по соотношению:

$$K_M = \frac{D_M}{D_A}, \quad (1)$$

где D_M и D_A – показания дозиметра – монитора и дозиметра для определения абсолютных значений нейтронных доз соответственно, полученные в режиме набора дозы за один и тот же интервал времени.

В исследованиях также оценена возможность применения для дозиметрии нейтронов ионизационной камеры 70127, входящей в комплект стандартного клинического дозиметра 27012.

Результаты. Измерена мощность тканевой дозы нейтронов, рассчитанная на единицу тока пучка дейтронов циклотрона У-120, которая на расстоянии 1 м от мишени оказалась равной $\sim 0{,}5 \frac{\text{сГр}}{\text{мин}*\mu\text{А}}$. Установлено, что вклад сопутствующего гамма-излучения в суммарную дозу на входе терапевтического пучка в облучаемую ткань составляет ~ 10 %. Так же было показано, что значение мониторного коэффициента, определяемого соотношением (1), зависит от площади формируемого терапевтического поля. Проведены измерения распределений дозы фонового нейтронного и гамма-излучения в плоскости торца формирующего устройства в направлении, перпендикулярном оси основного пучка нейтронов, что дает возможность с большей точностью оценить дозу, которую получает всё тело пациента за сеанс терапии. Также показано, что ионизационная камера 70127 обладает достаточно высокой чувствительностью к нейтронному излучению и может быть применена для решения ряда практических задач нейтронной дозиметрии. С помощью ионизационной камеры 70111 измерена мощность дозы от активности, наведенной нейтронным пучком в процедурном помещении и скорость ее уменьшения во времени, что является основой для регламентирования работы персонала при проведении сеансов терапии.

Выводы. Получена дозиметрическая информация, позволяющая улучшить качество дозиметрического планирования нейтронной терапии на циклотроне У-120.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Мусабаева Л. И., Жогина Ж. А., Слонимская Е. М., Лисин В. А. Современные методы лучевой терапии рака молочной железы. – Томск, 2003. – 200 с.
2. Wagner F. M., Specht H., Loeper-Kabasakal B., Breitkreutz H. Современное состояние терапии быстрыми нейтронами // Сибирский онкологический журнал. – 2015. – № 6. – С. 5–11.
3. Мусабаева Л. И., Головков В. М. Терапия быстрыми нейтронами в онкологии // Сибирский онкологический журнал. – 2015. – № 2. – С. 88 – 94.
4. Лисин В. А. Дозиметрическое компьютерное планирование терапии злокачественных опухолей пучком быстрых нейтронов циклотрона У-120 // Мед. радиология и радиационная безопасность. – 1991. – № 1.– С. 26– 28.

СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СТАЛИ 20Х13, ОБРАБОТАННОЙ ВЫСОКОИНТЕНСИВНЫМ ИМПУЛЬСНЫМ ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ

М.С Ямпольский[1], А.А. Клопотов[1,2]

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. Ю.Ф. Иванов[3,4]

[1] Томский государственный архитектурно-строительный университет,

Россия, г. Томск, пл. Соляная, 2, 634002

[2]Национальный исследовательский Томский государственный университет,

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

[3]Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

[4] Институт сильноточной электроники Сибирского отделения Российской академии наук,

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

E-mail: klopotovaa@tsuab.ru, yufi55@mail.ru

STRUCTURAL STEEL RESEARCH 20X13 TREATED WITH HIGH-INTENSITY PULSED ELECTRON BEAM

М.С Ямпольский[1], A.A. Klopotov[1,2]

Scientific Supervisor: Prof., Dr. Yu.F. Ivanov[3,4]

[1] Tomsk state university of architecture and building, Russia, Tomsk, sg. Soluanaua, 2, 634002

[2] National research Tomsk state university, Russia, Tomsk, Lenin Avenue, 30, 634050

[3] National research Tomsk polytechnic university, Russia, Tomsk, Lenin Avenue, 36, 634050

[4] Institute of High Current Electronics, Siberian Branch, Russian Academy of Sciences,

Russia, Tomsk, Akademichesky Avenue, 2/3, 634055

E-mail: klopotovaa@tsuab.ru, yufi55@mail.ru

Abstract. *A thermodynamic analysis of phase transformations occurring during heat processing of the alloy composition of Fe-Cr-C, which is the basis of steel 20X13. The results of the analysis of the elemental and phase composition, the defect substructure, stainless steel, formed because of irradiation of high-intensity pulsed electron beam.*

Введение. Технологии, основанные на использовании концентрированных потоков энергии (лазерное излучение, потоки плазмы, электронные и мощные ионные пучки и т.д.), позволяют проводить финишную обработку детали или изделия локально, только в тех местах, которые непосредственно испытывают экстремальные нагрузки в процессе эксплуатации, что существенно снижает уровень финансовых и энергетических затрат изготовителя [1].

Целью работы являлся анализ результатов и выявление закономерностей преобразования фазового состава и дефектной субструктуры промышленной стали 20Х13, подвергнутой облучению высокоинтенсивным импульсным электронным пучком субмиллисекундной длительности воздействия.

Материал и методика эксперимента. В качестве модифицируемого материала использована закаленная сталь 20Х13 (Fe-0.2 C-13 Cr, вес.%). Образцы имели форму шайбы толщиной 10 мм и диамет-

ром 15 мм. Модифицирование поверхностного слоя стали осуществляли облучением образцов высокоинтенсивным импульсным электронным пучком на установке «СОЛО». Параметры облучения: энергия электронов 18 кэВ, плотность энергии пучка электронов 30 Дж/см^2, длительность и количество импульсов воздействия 50 мкс и 3 имп., частота следования импульсов 0,3 с$^{-1}$; облучение проводили в аргоне при остаточном давлении 0,02 Па. Данный режим обеспечивал нагрев поверхностного слоя толщиной ≈5 мкм до температуры плавления и закалку из расплава со скоростями (10^6 – 10^8) К/с.

Результаты исследований и их обсуждение. Основными элементами стали 20Х13 являются Fe, Cr и C. В зависимости от режима термической обработки в данной тройной системе возможно образование частиц карбидной фазы состава M_3C, $M_{23}C_6$, M_7C_3, M_6C. Здесь M в химической формуле представляет собой сумму металлических элементов, образующих карбид. Например, $(Cr, Fe)_{23}C_6$, $(Fe, Cr)_3C$ и другие. Диаграмма состояния в системе Fe-Cr-C (рис. 1) по сечению при постоянном значении концентрации углерода C = 0.1 вес. % (что близко по концентрации углерода к использованной в настоящей работе стали) теоретически получена в [2]. Представленные результаты позволяют определить области существования двухфазных и трехфазных сплавов. Анализ диаграммы показывает, что карбид $M_{23}C_6$ является более стабильным, чем карбиды M_7C_3 и M_3C, и имеет место существование более протяженных двухфазных областей.

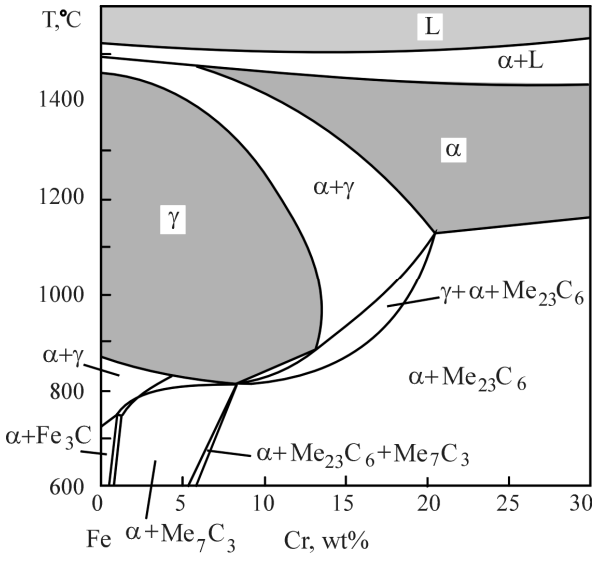


Рис. 1. Вычисленная диаграмма состояния в системе Fe-Cr-C по сечению при C = 0.1 вес. % [2].

Перед облучением сталь 20Х13 подвергали аустенизации при температуре 950 ^{0}C, (3 часа) и последующей закалке в масло. Выявлено формирование поликристаллического агрегата, средний размер зерен которого 16,1 мкм. Аустенизация стали привела к формированию по границам и в стыках границ зерен частиц второй фазы, которые являются карбидами на основе хрома состава $M_{23}C_6$ (рис. 2, а). Частицы имеют округлую, реже, глобулярную форму. Размеры частиц изменяются в пределах от 0,15 мкм до 0,3 мкм. Последующая закалка стали способствовала образованию кристаллов мартенсита (рис. 2, б).

Высокоинтенсивная электронно-пучковая обработка в режиме плавления поверхностного слоя предварительно закаленной стали приводит к формированию градиентной многофазной структуры.

Слой, формирующийся в результате высокоскоростной кристаллизации (поверхностный слой толщиной не менее 5 мкм), характеризуется полным растворением субмикронных частиц карбида типа $M_{23}C_6$, присутствующих в стали исходного состояния; малым размером зерен α-фазы; наличием многофазной структуры ячеистого типа (рис. 2, в). В слое, расположенном на глубине ≈20 мкм (зона термического влияния), наблюдается контактное плавление объемов стали, содержащих субмикронные частицы карбида типа $M_{23}C_6$. Последующее высокоскоростное охлаждение материала сопровождается формированием структуры ячеистой кристаллизации, располагающейся в объеме слоя островками размерами от 0,5 мкм до 1,0 мкм.

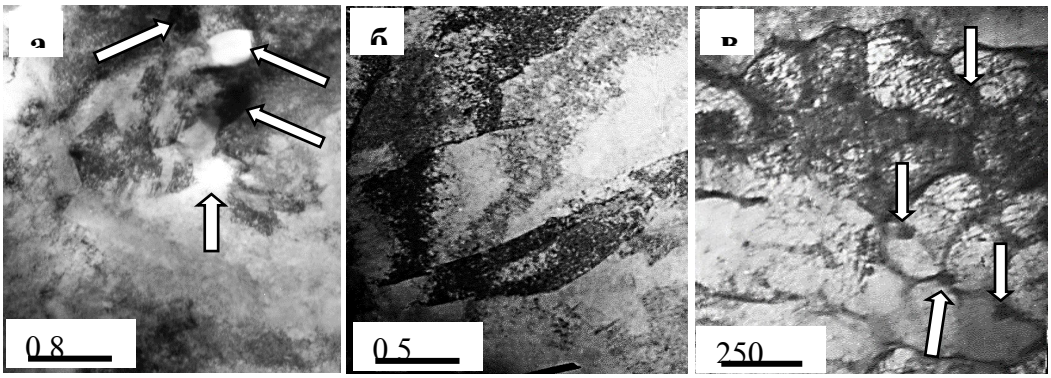


Рис. 2. Структура стали 20Х13 перед (а, б) и после (в) облучения интенсивным импульсным электронным пучком. Стрелками на (а) и (в) указаны частицы карбида $M_{23}C_6$.

Заключение. Выполнен краткий термодинамический анализ фазовых превращений, имеющих место при термической обработке в системе Fe-Cr-C, являющейся основой стали 20Х13. Показано, что в равновесных условиях в данном материале возможно формирование как твердых растворов на основе α-железа (ОЦК кристаллическая решетка) и γ-железа (ГЦК кристаллическая решетка), так и целого спектра карбидных фаз сложного элементного состава ($M_{23}C_6$, M_7C_3, M_3C и M_3C_2, где под символом М подразумеваются атомы металлических элементов Fe и Cr). Показано, что электронно-пучковая обработка стали в режиме плавления и последующей высокоскоростной кристаллизации сопровождается преобразованием структуры поверхностного слоя, заключающемся (1) в полном растворении частиц исходной карбидной фазы; (2) в формировании ячеек дендритной кристаллизации субмикронных размеров; (3) в повторном выделении наноразмерных частиц карбидной фазы.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта РФФИ (проект № 16-43-700659-р_а)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Грибков В.А., Григорьев Ф.И., Калин Б.А. др. Перспективные радиационно-пучковые технологии обработки металлов. – М.: Круглый стол, 2001. – 528 с.
2. Durand-Charre M. Microstructure of steels and cast irons. - Published by Springer Berlin Heidelberg. – 2004.

АНАЛИЗ СПЕКТРОВ ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ ПОЛОС $2\nu_1$, $\nu_1 + \nu_3$ И $2\nu_3$ МОЛЕКУЛЫ $^{32}S^{16}O^{18}O$

Ян Иншу

Научные руководители: профессор, д.ф.-м.н. О.Н. Уленеков, профессор к.ф.-м.н. О.В. Громова

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: 978437082@qq.com

ANALYSIS OF HIGH-RESOLUTION SPECTRA OF THE BANDS $2\nu_1$, $\nu_1 + \nu_3$ AND $2\nu_3$ *OF THE* $^{32}S^{16}O^{18}O$ MOLECULE

Yang Yingshu

Scientific Supervisors: Prof., O.N. Ulenikov, Prof., O.V.Gromova

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

E-mail: 978437082@qq.com

Abstract. *The high resolution infrared spectra of the $^{32}S^{16}O^{18}O$ molecule were recorded with a Bruker IFS 120 HR Fourier transform interferometer for the first time in the region of 1800 - 2800 cm^{-1} where the bands $2\nu_1$, $\nu_1 + \nu_3$, and $2\nu_3$ are located. The subsequent weighted fit of experimentally assigned transitions was made with the Hamiltonian model which takes into account the resonance interactions between the studied vibrational states.*

Введение. Диоксид серы - одно из важнейших химических соединений, которое используется в научных исследованиях в таких областях как химия, астрофизика, атмосферная оптика, лазерная физика и т.д. SO_2 играет важную роль в эволюции и извержении вулканов [1]. Сернистый ангидрид (SO_2) - бесцветный газ с резким запахом, один из главных загрязнителей атмосферы. Диоксид серы образуется при сжигании ископаемого топлива на предприятиях топливно-энергетического комплекса и в двигателях внутреннего сгорания, а также на предприятиях нефтехимического комплекса. Сернистый газ вреден не только для окружающей среды, но и для человека. В атмосфере он реагирует с водяным паром с образованием вторичного загрязнителя – серной кислоты (H_2SO_4) [2, 3]. В целом SO_2 - одно из самых важных соединений в атмосферном цикле Земли [4]. Чтобы решить проблемы удаленного обнаружения и контроля SO_2 на месте, важно детальное знание структуры спектров поглощения SO_2 в различных областях спектра электромагнитных волн, особенно в инфракрасной области излучении [5]. Исследование спектров высокого разрешения двуокиси серы также важно для планетологии, например, в атмосфере Венеры, где содержание двуокиси серы в миллион раз выше, чем в атмосфере Земли [6, 7].

В течение многих лет проводились спектроскопические исследования данной молекулы в микроволновой, субмиллиметровой и в инфракрасной области [8]. Однако, существует необходимость в дальнейших лабораторных исследованиях спектроскопических характеристик диоксида серы. Поэтому целью данной работы является изучение колебательно-вращательного спектра высокого разрешения полос $2\nu_1$, $\nu_1 + \nu_3$ и $2\nu_3$ молекулы $^{32}S^{16}O^{18}O$, которые не исследовались ранее.

Методы исследования. В спектральной области 1800 - 2800 $см^{-1}$ на инфракрасном Фурье спектрометре *Bruker IFS 120 HR* в сочетании с ячейкой Уайта были зарегистрированы четыре спектра.

Источником излучения является глобар. Окна поглощающей ячейки были изготовлены с применениемKBr, CaF_2-светоделитель и полупроводниковый детектор с антимонидом индия (InSb) были использованы для регистрации спектров.

Допплеровское уширение для $^{32}S^{16}O^{18}O$ при 298 К составляет от 0,0027 см$^{-1}$ (при 1800 см$^{-1}$) до 0,0042 см$^{-1}$ (при 2800 см$^{-1}$). Уширение давлением было между 0,00003 и 0,0014 см$^{-1}$ в используемом диапазоне давлений от 10(I) до 280(II) Па. Время измерения составляло около 2,4 мин на одно сканирование (полное время регистрации от 11 до 43 часов). Спектры были откалиброваны с помощью линий молекулы N_2O при парциальном давлении N_2O около 10 Па.

Исследуемые спектры I и II в области 2100 - 2700 см$^{-1}$ приведены на рис.1. Полосы трех различных изотопических соединений, $^{32}S^{16}O_2$, $^{32}S^{18}O_2$ и $^{32}S^{16}O^{18}O$, наблюдаются в обоих спектрах. Однако, как видно из сравнения спектров I и II, наличие $^{32}S^{16}O^{18}O$ в образце II выше, чем в образце I. Таким образом, полоса $2\nu_1$ молекулы $^{32}S^{16}O^{18}O$ (центр полосы 2240 см$^{-1}$) значительно лучше выражена в спектре II.

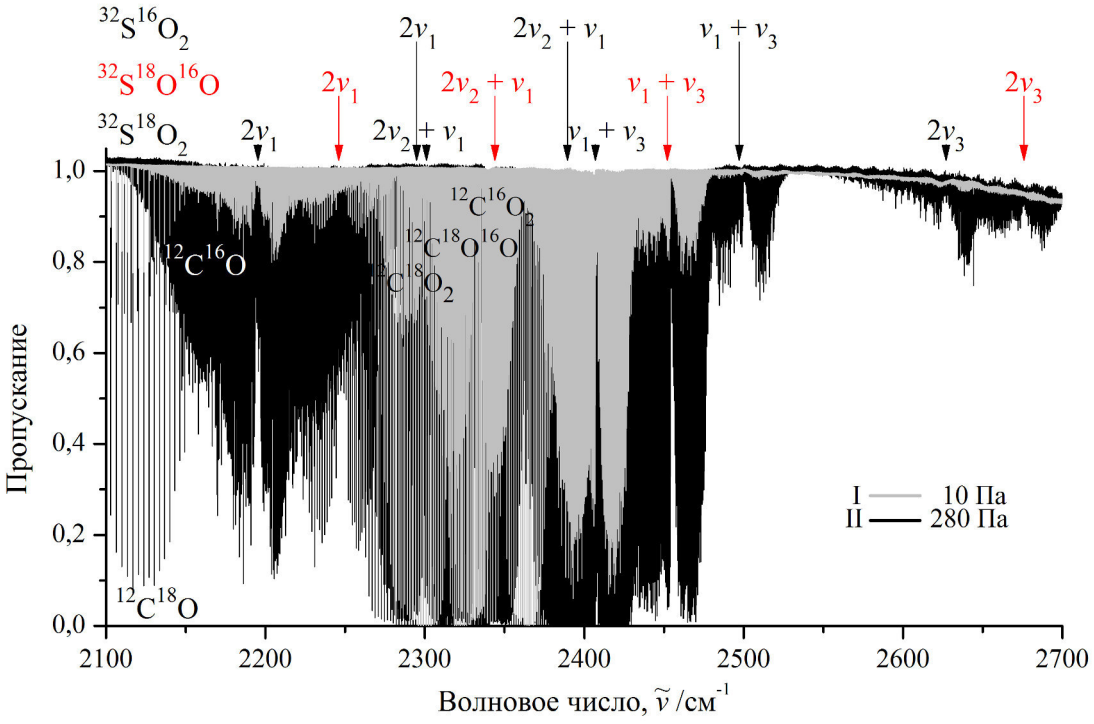


Рис. 1. Спектры I и II молекулы $^{32}S^{16}O^{18}O$ в области 2100-2700 см$^{-1}$

Исследуемые полосы принадлежит к *a*-типу и *b*-типу и имеет следующие правила отбора: $\Delta J = 0, \pm 1$ и $\Delta K_a = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, ..., \Delta K_c = \pm 1, \pm 3, ...$ Вращательные энергии основного состояния были рассчитаны с помощью параметров из работы [9].

Результат. В результате работы был исследован колебательно-вращательный спектр высокого разрешения в районе полос $2\nu_1$, $\nu_1 + \nu_3$ и $2\nu_3$ молекулы $^{32}S^{16}O^{18}O$, которые не исследовались ранее. Около 3500, 3900 и 2850 переходов со значениями квантовых чисел J/Ka, равными 59/20, 68/25 и 43/18

определены для полос $2\nu_1$, $\nu_1 + \nu_3$ и $2\nu_3$, соответственно. В результате решения обратной спектроскопической задачи получен набор из 39 параметров, который воспроизводит исходные данные с экспериментальной точностью.

Таблица 1

Спектроскопические параметры колебательного состояния (200) (101) (002) молекулы $^{32}S^{16}O^{18}O$ (в см$^{-1}$)

Параметры	(200)	(101)	(002)	(000)
E	2240.351232(28)	2454.025702(25)	2674.782845(29)	---
A	1.9742528(11)	1.95281269(86)	1.93174999(94)	1.97140279376
B	0.32129068(18)	0.32175733(15)	0.32221930(20)	0.32437916881
C	0.275551346(88)	0.275536284(51)	0.27561746(20)	0.277910933117
$\Delta_K \times 10^4$	0.83648(11)	0.81428(18)	0.79196(14)	0.814875996
$\Delta_{JK} \times 10^5$	-0.3263(11)	-0.3692(18)	-0.3996(14)	-0.361443882
$\Delta_J \times 10^6$	0.19374(17)	0.19754(17)	0.20175(18)	0.1969054

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wallace PJ. Volcanic SO_2 emissions and the abundance and distribution of exsolved gas in magma bodies. J Volcanol Geotherm Res 2001;108:85-106.
2. Self S, RAmpino MR, Barbera JJ. The possible effects of large 19th and 20th century volcanic eruptions on Zonal and hemispheric surface temperatures. J Volcanol Geotherm Res 1981;11:41-60.
3. McCormic MP, Thompson LW, Trepte CR, Atmospheric effects of the Mount Pinatubo eruption. Nature 1995;373:399-404.
4. Charlson RJ, Anderson TL, McDuff RE. The Sulfur Cycle. In: Butcher SS, Charlson RJ, Orian GH, Wilfe GV (eds) Global biogeochemical cycles. Academic, San Diego, 285-299.
5. Huang X, Schwenke DW, Lee TJ. Empirical infrared line lists for five SO_2 isotopologues: $^{32/33/34/36}S^{16}O_2$ and $^{32}S^{18}O_2$. J Mol Spectrosc 2015;311:19-24.
6. Bezard B, DeBergh C, Fegley B, Maillard J-P, Crips D, Owen T, Pollack JB, Grinspoon D. The abundance of sulfur dioxide below the clouds of Venus. Geophys Res Lett 1993;20:1587-1590.
7. Marcq E, Betraux J-L, Montmessin F, Belyaev D. Variations of sulfur dioxide at the cloud top of Venus's dynamic atmosphere. Nature Geoscience 2013;6:25-28.
8. Ulenikov ON, Onopenko GA, Gromova OV, Bekhtereva ES, Horneman V-M. Re-analysis of the (100), (001), and (020) rotational structure of SO_2 on the basis of high resolution FTIR spectra. J Quant Spectrosc Radiat Transf 2013;130:220-232.
9. Ulenikov ON, Bekhtereva ES, Krivchikova YuV, Zamotaeva VA, Buttersack T, Sydow C, Bauerecker S. Study of high resolution spectrum of $^{32}S^{16}O^{18}O$: The ν_1 and ν_3 bands. J Quant Spectrosc Radiat Transf 2016;168:29-39.

Научное издание

ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ НАУК

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

Издано в авторской редакции

Компьютерная верстка С.А. Поробова

Редактор Г.А. Воронова, И.А. Курзина

Тираж 100 экз.

Национальный исследовательский
Томский политехнический университет
Система менеджмента качества
Издательства Томского политехнического
университета сертифицирована в соответствии с
требованиями ISO 9001:2008
. 634050, г. Томск, пр. Ленина, 30
Тел./факс: 8(3822)56-35-35, www.tpu.ru