

**ИАТЭ НИЯУ МИФИ  
ЛАБОРАТОРИЯ МАТЕРИАЛОВ ИАТЭ**



**ХІІІ МЕЖДУНАРОДНЫЙ СЕМИНАР**

**СТРУКТУРНЫЕ ОСНОВЫ МОДИФИЦИРОВАНИЯ  
МАТЕРИАЛОВ**

**МНТ-ХІІІ**

**ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ**

**29 июня – 2 июля 2015г.**

**ОБНИНСК**

Международный семинар «Структурные основы модифицирования материалов» МНТ-ХШ проведен при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (грант 15-02-20442-г) и ООО «Лаборатория материалов ИАТЭ»

Тезисы докладов опубликованы в авторской редакции.

## СОДЕРЖАНИЕ

**Плаксин О.А.**

ДИНАМИЧЕСКИ УСТОЙЧИВЫЕ НАНОСТРУКТУРЫ В  
КВАРЦЕВОМ СТЕКЛЕ, ИМПЛАНТИРОВАННОМ  
ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ

**Селищев П.А., Акинтуде С.**

КИНЕТИКА ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ НА ПОВЕРХНОСТИ  
РАЗДЕЛА ТВЕРДЫХ ТЕЛ ПОД ОБЛУЧЕНИЕМ

**О.В.Крисько, В.М. Сионов, Т.В.Скоробогатова**

РАСЧЕТ ТЕМПЕРАТУРНОГО ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ  
ЩЕЛОЧНЫХ И ЩЕЛОЧНОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ  
МЕТОДОМ ГЛАДКОГО НЕЛОКАЛЬНОГО МОДЕЛЬНОГО  
ПОТЕНЦИАЛА

**Л.Энхтор, В.М. Сионов**

УПРЯДОЧЕНИЕ В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ СИСТЕМЫ  
ЖЕЛЕЗО-РЕНИЙ

**Алсараева К.В., Коновалов С.В., Громов В.Е., Иванов Ю.Ф.**

ИЗМЕНЕНИЕ СВОЙСТВ ПОВЕРХНОСТИ СИЛУМИНА  
ПОСЛЕ ЭЛЕКТРОННО-ПУЧКОВОЙ ОБРАБОТКИ И  
МНОГОЦИКЛОВОГО УСТАЛОСТНОГО НАГРУЖЕНИЯ

**Андриевский Р.А.**

ВЛИЯНИЕ ИОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ НА СВОЙСТВА  
НАНОМАТЕРИАЛОВ

**Антонова Л.Х., Демихов Т.Е., Троицкий А.В., Дидык А.Ю.,  
Михайлова Г.Н.**

ВЛИЯНИЕ ПРОТОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ 2.5 МэВ НА  
КРИТИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ВТСП ЛЕНТ ВТОРОГО  
ПОКОЛЕНИЯ

**Базалеева К.О., Цветкова Е.В.**

СЕЛЕКТИВНОЕ ЛАЗЕРНОЕ ПЛАВЛЕНИЕ АУСТЕНИТНОГО

СПЛАВА Fe-17%Cr-12%Ni-2%Mo-1%Mn-0.7%Si-0.02%C

**Башенко Л.П., Громов В.Е., Будовских Е.А., Иванов Ю.Ф.**  
МОДИФИЦИРОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЕВ ТИТАНА  
VT1-0

**Бер Л.Б**  
О НЕКОТОРЫХ ЗАКОНОМЕРНОСТЯХ ВЛИЯНИЯ  
ЛЕГИРОВАНИЯ ГРАНУЛИРУЕМЫХ ЖАРОПРОЧНЫХ  
НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ НА ИХ МИКРОСТРУКТУРУ,  
ПРОЧНОСТЬ И ПЛАСТИЧНОСТЬ.

**Бер Л.Б, Казберович А.М., Исаев М.А.**  
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИЗОТЕРМИЧЕСКИХ ТВП-ДИАГРАММ  
РАСПАДА  $\gamma$ -ТВЁРДОГО РАСТВОРА ЖАРОПРОЧНЫХ  
НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ  
ЗАКАЛОЧНОГО ОХЛАЖДЕНИЯ ЗАГОТОВОК ДИСКОВ В  
ВАКУУМНЫХ ПЕЧАХ

**Антошина И.А.**  
ФАЗОВЫЕ СОСТОЯНИЯ В СИСТЕМЕ Bi-Te

**Бобров И.П.**  
УТОЧНЕНИЕ СТРУКТУРЫ ГИДРОКСИАПАТИТА КАЛЬЦИЯ  
ПОЛУЧЕННОГО МЕТОДОМ ГИДРОЛИЗА

**Быков П.В., Воробьев В.Л., Баянкин В.Я.**  
ИЗМЕНЕНИЕ СОСТАВА И СТРУКТУРЫ ПОВЕРХНОСТНЫХ  
СЛОЕВ СТАЛИ Ст3 С НАНЕСЕННЫМ ПОКРЫТИЕМ  
МЕТОДОМ ИОННО-ЛУЧЕВОГО ПЕРЕМЕШИВАНИЯ

**Быков П.В., Тарасенков А.Н., Воробьев В.Л., Баянкин В.Я.**  
ВЛИЯНИЕ ИОННО-ЛУЧЕВОГО ПЕРЕМЕШИВАНИЯ НА  
ФОРМИРОВАНИЕ СОСТАВА ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЕВ  
ПРОКАТАННЫХ ТИТАНОВЫХ ФОЛЬГ С НАПЫЛЕННЫМ  
СЛОЕМ АЛЮМИНИЯ

**Воробьев В.Л., Быков П.В., Баянкин В.Я.**

МОДИФИКАЦИЯ СОСТАВА, СТРУКТУРЫ И ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СТАЛИ СТЗ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ УСКОРЯЮЩЕГО НАПРЯЖЕНИЯ В ПРОЦЕССЕ ИМПУЛЬСНОГО ОБЛУЧЕНИЯ ИОНАМИ  $CR^+$

**Воробьев В.Л., Бакиева О.Р., Мухгалин В.В.**

ИЗМЕНЕНИЯ В ХИМИЧЕСКОМ СОСТАВЕ И ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЕ ПОВЕРХНОСТИ СПЛАВОВ Cu-Ni И Cu-Mn ПОСЛЕ ОБЛУЧЕНИЯ ИОНАМИ АРГОНА И КИСЛОРОДА

**Воробьев В.Л., Бакиева О.Р., Баянкин В.Я., Гильмутдинов Ф.З., Картапова Т.С.**

ИЗМЕНЕНИЕ СОСТАВА, СТРУКТУРЫ И ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ АРМКО-ЖЕЛЕЗА, ЛЕГИРОВАННЫХ УГЛЕРОДОМ МЕТОДОМ ИОННО-ЛУЧЕВОГО ПЕРЕМЕШИВАНИЯ

**Воробьев В.Л., Решетников С.М., Гильмутдинов Ф.З., Борисова Е.М., Бакиева О.Р.**

ВЛИЯНИЕ ИМПЛАНТАЦИИ КИСЛОРОДА НА КОРРОЗИОННО-ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЖЕЛЕЗА

**Вьюненко Ю.Н.**

ОСОБЕННОСТИ ДЕФОРМАЦИОННО-СИЛОВЫХ СВОЙСТВ «МЕТАЛЛИЧЕСКИХ МЫШЦ» ИЗ СПЛАВА TiNi

**Степанов В.А., Горчаков К.А.**

ГИДРОФИЛЬНОСТЬ И ИК-СПЕКТРОСКОПИЯ АДСОРБИРОВАННОЙ ВОДЫ

**Гончарова Е.Н., Романов Д.А., Будовских Е.А., Громов В.Е., Антоненко А.И.**

ФАЗОВЫЙ И ЭЛЕМЕНТНЫЙ АНАЛИЗ ПОКРЫТИЙ  $TiV_2-Mo$  И  $TiV_2-Ni$ , СФОРМИРОВАННЫХ НА СТАЛИ

ЭЛЕКТРОВЗРЫВНЫМ МЕТОДОМ ПОСЛЕ ОБРАБОТКИ  
ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ

**Емалетдинов А.К.**

СВОЙСТВА И КИНЕТИКА ДИСЛОКАЦИЙ СОМИЛИАНЫ  
ПРИ ДЕФОРМАЦИИ АМОРФНЫХ МАТЕРИАЛОВ

**Емалетдинов А.К., Галактионова А.В.**

ВЛИЯНИЕ ДИСЛОКАЦИОННОЙ СТРУКТУРЫ НА  
ДИФфуЗИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ В ЖАРОПРОЧНОМ СПЛАВЕ  
ПРИ ТЕРМОУСТАЛОСТИ

**Емалетдинов А.К., Галактионова А.В.**

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВИБРАЦИОННОЙ НАГРУЗКИ  
НА КИНЕТИКУ ПОР

**Емалетдинов А.К.**

ПРИМЕНЕНИЕ ПРИНЦИПОВ СИНЕРГЕТИКИ ПРИ  
МОДЕЛИРОВАНИИ ПРОЦЕССОВ ПЛАЗМЕННОГО  
НАПЫЛЕНИЯ

**Жихарев А.В., Баянкин В.Я., Климова И.Н.**

ФОРМИРОВАНИЕ СОСТАВА ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЕВ  
СИСТЕМЫ  $(Ni_{50}Cu_{50})+Al$  ПРИ РАССФОКУСИРОВАННОМ  
ЛАЗЕРНОМ ОБЛУЧЕНИИ

**Е.И. Исаев, В.А. Степанов**

РАДИАЦИОННО-ИНДУЦИРОВАННЫЕ СТАЦИОНАРНЫЕ  
СТРУКТУРНЫЕ СОСТОЯНИЯ В ПИРОЛИТИЧЕСКОМ  
НИТРИДЕ БОРА

**Карасева Е.В., Мац А.В., Соколенко В.И., Савчук Е.С.,  
Фролов В.А., Шульгин Н.А.**

ОСОБЕННОСТИ ПОЛЗУЧЕСТИ  
НАНОСТРУКТУРИРОВАННОГО  $Zr$  И СПЛАВА  $Zr1Nb$   
ПОЛУЧЕННЫХ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ  
ДЕФОРМАЦИЕЙ ПРОКАТКОЙ

**Козик В.Г., Степанов П.А., Атрошенко И.Г., Шуткина О.В.**  
ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОЗАЩИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ  
ПЕРСПЕКТИВНОГО РАДИОПРОЗРАЧНОГО ОБТЕКАТЕЛЯ  
ЛЕТАТЕЛЬНОГО АППАРАТА

**Козлов И.В., Усов Н.А., Гудошников С.А., Антошина И.А.**  
ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ И  
МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ АМОΡФНЫХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ  
МИКРОПРОВОДОВ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ТЕРМИЧЕСКОЙ  
ОБРАБОТКИ

**Колотов А.А., Баянкин В.Я.**  
ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ И СОСТАВА  
ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ АМОΡФНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА  
ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА В УСЛОВИЯХ ИОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ

**Лисичкин Ю.В., Сахарова Л.А.**  
МОДЕЛИРОВАНИЕ АВТОКОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ  
АТОМА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ЖИДКОСТИ С УЧЁТОМ  
ТРАНСЛЯЦИОННОЙ И ВРАЩАТЕЛЬНОЙ ОГРАНИЧЕННОЙ  
ДИФФУЗИИ

**Мануковская Д.В., Сидоров Н.В., Палатников М.Н.**  
ФРАКТАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ФОТОИНДУЦИРОВАННОГО  
РАССЕЯНИЯ СВЕТА В КРИСТАЛЛАХ  $\text{LiNbO}_3$

**Прохоров И.А., Асадчиков В.Е., Рошин Б.С., Буташин А.В.,  
Дерябин А.Н.**  
РОСТ И ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ ВЫСОКОСОВЕРШЕННЫХ  
МОНОКРИСТАЛЛОВ ЛЕЙКОСАПФИРА ДЛЯ  
РЕНТГЕНООПТИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ

**Прохоров И.А., Серебряков Ю.А., Сидоров В.С., Власов В.Н.,  
Стрельченко С.С.**  
МИКРООДНОРОДНОСТЬ КРИСТАЛЛОВ  $\text{Ge(Ga)}$ ,  
ВЫРАЩЕННЫХ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ВОЗМУЩЕНИЯХ

## ПРОЦЕССА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

**Морозов К.В., Громов В.Е., Алсараева К.В., Перегудов О.А.,  
Коновалов С.В., Иванов Ю.Ф.**

СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ В  
ПОВЕРХНОСТНОМ СЛОЕ РЕЛЬСОВ ПРИ ДЛИТЕЛЬНОЙ  
ЭКСПЛУАТАЦИИ

**Сарычев В.Д., Невский С.А., Коновалов С.В., Алсараева К.В.,  
Громов В.Е.**

ТЕРМОКАПИЛЛЯРНАЯ МОДЕЛЬ ОБРАЗОВАНИЯ  
НАНОСТРУКТУР НА ПОВЕРХНОСТИ МЕТАЛЛОВ  
ОБРАБОТАННЫХ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИМ  
ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ

**И.И. Папилов, А.А. Николаенко, А.И. Пикалов, П.И. Стоев,  
Т.Г. Емлянинова, Ю.В. Тузов**

ЗАВИСИМОСТЬ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ОТ  
СТРУКТУРНЫХ ФАКТОРОВ ЛИТОГО БЕРИЛЛИЯ

**В.А. Печенкин, А.Д. Чернова, В.Л. Молодцов**

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФфуЗИОННОГО МАССОПЕРЕНОСА  
В СПЛАВАХ ПРИ ВЫСОКИХ ДОЗАХ ИОННОГО  
ОБЛУЧЕНИЯ

**Серебряков Ю.А., Захаров Б.Г., Сидоров В.С., Прохоров И.А.,  
Коробейникова Е.Н., Власов В.Н., Артемьев В.К., Фоломеев  
В.И.**

ВЫРАЩИВАНИЕ ВЫСОКООДНОРОДНЫХ КРИСТАЛЛОВ  
ПОЛУПРОВОДНИКОВ: КОСМИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ И  
НАЗЕМНЫЕ АЛЬТЕРНАТИВЫ

**Скворцова Н.П.**

ЖЕСТКАЯ ПОТЕРЯ УСТОЙЧИВОСТИ ПЛАСТИЧЕСКОЙ  
ДЕФОРМАЦИИ МОНОКРИСТАЛЛОВ ПАРАТЕЛЛУРИТА

**Дьяконова Н.П., Захарова Е.А., Свиридова Т.А.**



**ВЛИЯНИЕ КОЛИЧЕСТВА БОРА НА  
СТЕКЛООБРАЗУЮЩУЮ СПОСОБНОСТЬ АМОРФНЫХ  
СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА ПРИ МЕХАНОАКТИВАЦИИ**

**Теплякова Н.А., Сидоров Н.В., Палатников М.Н.**  
**КОМБИНАЦИОННОЕ И ФОТОИНДУЦИРОВАННОЕ  
РАСSEЯНИЕ СВЕТА В КРИСТАЛЛАХ НИОБАТА ЛИТИЯ**

**Д.Л. Тытик, С.А. Бусев, А.А. Ревина, В.И. Кузьмин, А.Ф.  
Гадзаов**  
**КИНЕТИКА ОБРАЗОВАНИЯ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА В  
ОБРАТНЫХ МИЦЕЛЛАХ**

**Ушаков И.В., Батомункуев А.Ю.**  
**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА  
ЗАЛЕЧИВАНИЯ ТРЕЩИН ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЛАЗЕРНЫХ  
ИМПУЛЬСОВ**

**Хаймович П.А.**  
**НАНОСТРУКТУРИРОВАНИЕ МЕТАЛЛОВ  
КРИОДЕФОРМИРОВАНИЕМ ПРИ ВСЕСТОРОННЕМ  
СЖАТИИ**

**П.А. Хаймович, Е.В. Черняева, Н.А. Шульгин**  
**ВЛИЯНИЕ ПРИЛОЖЕНИЯ СИЛ ВСЕСТОРОННЕГО СЖАТИЯ  
ПРИ КРИОГЕННЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ НА СВОЙСТВА  
СПЛАВА ВТ1-0**

**Чубаров В.В., Силонов В.М.**  
**МЕТАСТАБИЛЬНЫЙ ХАРАКТЕР АМОРФНОГО ЛЬДА  
ВБЛИЗИ ТОЧКИ ПЛАВЛЕНИЯ**

# **ДИНАМИЧЕСКИ УСТОЙЧИВЫЕ НАНОСТРУКТУРЫ В КВАРЦЕВОМ СТЕКЛЕ, ИМПЛАНТИРОВАННОМ ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ**

**Плаксин О.А.**

*Россия, Обнинск, ИАТЭ НИЯУ МИФИ*

*plax@mail.ru*

Для получения наночастиц металла, внедренных в слои прозрачных диэлектриков, широко используется имплантация тяжелых ионов при потоке до  $10^{15}$  ионов/см<sup>2</sup>с. При имплантации с постоянным потоком ионов достигается состояние насыщения и формируется динамически устойчивая структура, в которой распределение наночастиц по размерам и глубине, химический и фазовый состав имплантированного слоя не зависят от флюенса ионов. Например, в кварцевом стекле крупные наночастицы меди располагаются в приповерхностном слое, отделенном обедненной зоной от мелких наночастиц, расположенных в глубине.

В настоящей работе проведен теоретический анализ кинетики формирования динамически устойчивых структур при имплантации кварцевого стекла ионами Au<sup>-</sup> и Cu<sup>-</sup> с энергией 60 кэВ. Анализ проводился в рамках одномерной модели эволюции распределения имплантированных атомов по глубине, учитывающей распыление поверхности имплантированного слоя, производство, дрейф и диффузию имплантированной массы.

Теоретический анализ показал, что в состоянии насыщения количество имплантированных атомов, оставшихся в облучаемой подложке (удержанный флюенс), не зависит от деталей распределения имплантируемых ионов по длине пробега. Удержанный флюенс определяется соотношениями между потоком имплантируемых ионов, проективным пробегом ионов, скоростью распыления поверхности, скоростью дрейфа

имплантированной массы и коэффициентом диффузии имплантированных атомов.

Предложен способ оценки вклада распыления поверхности в кинетику насыщения, основанный на расчете удержанного флюенса из экспериментальных данных по скорости распыления и сравнении полученного расчетного значения со значением, измеренным экспериментально, например, при регистрации спектров оптического поглощения нанокompозитов во время ионной имплантации.

Проведенные оценки показывают, что распыление поверхности доминирует в кинетике насыщения при имплантации кварцевого стекла ионами  $Au^-$  с энергией 60 кэВ. При имплантации кварцевого стекла ионами  $Cu^-$  с энергией 60 кэВ вклад распыления поверхности не является доминирующим.

Формирование динамически устойчивых структур при имплантации кварцевого стекла ионами  $Cu^-$  с энергией 60 кэВ невозможно объяснить без учета дрейфа имплантированной массы. Предложен способ оценки вклада дрейфа в кинетику насыщения на основании изображений динамически устойчивой структуры. Показано, что вклад дрейфа увеличивается с увеличением потока имплантированных ионов. Продемонстрирован механизм формирования обедненной зоны в динамически устойчивой структуре, связанный с обращением скорости дрейфа в нуль в пределах имплантированного слоя. Дрейф имплантированной массы обеспечивается подвижными ионами  $Cu^+$  в твердом растворе.

# КИНЕТИКА ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ НА ПОВЕРХНОСТИ РАЗДЕЛА ТВЕРДЫХ ТЕЛ ПОД ОБЛУЧЕНИЕМ

Селищев П.А., Акинтуде С.

*Южно-Африканская Республика, Отделение Физики,  
Университет Претории  
selyshchev@gmail.com*

Предложена теоретическая модель, которая описывает образование слоя  $AB$ -соединения между слоями  $A$ - и  $B$ - твердых тел под облучением.  $AB$ -слой растет в результате химической реакции, которая происходит на его границах. Реакция обеспечивается диффузией  $A$ - и  $B$ -атомов через  $AB$ -слой к соответствующим поверхностям. Облучение создает вакансии и междоузельные атомы, которые формируют новые механизмы диффузии и влияют на рост  $AB$ -слоя. При наличии радиационно-индуцируемых вакансий коэффициент диффузии  $A$ - и  $B$ -атомов по вакансионному механизму увеличивается в  $(n_v/n_v^{th})$  раз, где  $n_v^{th}$  - термическая плотность вакансий.  $n_v$  - плотность вакансий под облучением, которая находится из уравнения

$$K - \frac{n_v - n_v^{th}}{\tau_v} + D_v \Delta n_v = 0$$

Вклад междоузельных атомов находим из решения соответствующей диффузионной задачи. Предполагается, что диффузионный поток атомов, приходящих к поверхности, равен их потреблению в химической реакции. Скорость, которая описывает химическую реакцию между  $A$ -атомами в междоузельном положении и  $B$ -атомами  $B$ -слоя, аппроксимируется выражением

$$\phi_{ib} = \begin{cases} \gamma n_b^0 n_b^0 = const & n_i^a(x = h_b) \geq n_b^0 \\ \gamma n_b^0 n_i^a(x = h_b) & n_i^a(x = h_b) \leq n_b^0 \end{cases}$$

где  $n_a^0$  и  $n_b^0$  - плотности of A- и B-атомов A- и B-тел соответственно.  $n_i^a(x = h_b)$  - плотность междоузельных атомов при  $x=h_b$ , на поверхности раздела AB-слоя и B-тела. Реакция между A- и B- атомами на поверхности раздела AB-слоя и A-тела аппроксимируется аналогично. Рост толщины AB-слоя определяется выражением

$$\frac{dh}{dt} = \frac{dh_a}{dt} + \frac{dh_b}{dt} = V_{ab}(\phi_{va} + \phi_{ia} + \phi_{vb} + \phi_{ib})$$

где  $V_{ab}$  - объем, приходящийся на одну AB-молекулу.

Плотность A-атомов у поверхности B – тела (и B- атомов у A-тела) уменьшается по-мере роста AB-слоя. Если в начальный момент ( $t=0, h=0$  и  $n_a^0 > n_b^0$ ) существует избыток, например, A-атомов, то существует критический момент,  $t_c$ , при котором стехиометрия восстанавливается ( $t=t_c$  и  $n_i^a(x = h_b) + n_i^b(x = h_b) = n_a = n_b^0$ ) и зависимость скорости химической реакции меняется.

Критический момент и соответствующая толщина AB-слоя равны

$$t_c = \frac{D_a(n_a^0 - n_b^0)}{\gamma^2 V_{ab} (n_b^0)^4} \text{ и } h_c = h(t_c) = \gamma (n_b^0)^2 V_{ab} t_c = \frac{D_a(n_a^0 - n_b^0)}{\gamma (n_b^0)^2}$$

При  $t \leq t_c$ , плотность A-атомов внутри AB-слоя и его толщина

$$n_a(x) = -\frac{\gamma (n_b^0)^2}{D_a} x + n_a^0 \quad \text{и} \quad h(t) = \gamma (n_b^0)^2 V_{ab} t$$

При  $t \geq t_c$ , имеем  $n_a(x, t) = -\frac{\gamma n_a^0 n_b^0}{D_a + \gamma n_b^0 h(t)} x + n_a^0$  и

$$h(t) = \frac{D_a}{m_b^0} \left( -I + \sqrt{\left( I + \frac{m_b^0 h_c}{D_a} \right)^2 + \frac{2\gamma^2 V_{ab} (n_b^0)^2 n_a^0}{D_a} (t - t_c)} \right)$$

Таким образом, линейный рост АВ-слоя сменяет параболический при  $t_c$ .

Облучение ускоряет рост АВ-слоя. В зависимости от условий облучения оценки критической толщины АВ-слоя дают 2-40 нм, что близко экспериментальным данным.

**РАСЧЕТ ТЕМПЕРАТУРНОГО  
ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ ЩЕЛОЧНЫХ И  
ЩЕЛОЧНОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ МЕТОДОМ  
ГЛАДКОГО НЕЛОКАЛЬНОГО МОДЕЛЬНОГО  
ПОТЕНЦИАЛА**

©2015 г. О.В.Крисько<sup>1</sup>, В.М. Сионов<sup>2</sup>, Т.В.Скоробогатова<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Владимирский государственный университет, факультет  
физики и прикладной математики,  
кафедра функционального анализа и его приложений*

<sup>2</sup> *Московский государственный университет имени  
М.В. Ломоносова, физический факультет, кафедра физики  
твёрдого тела.*

Применение квантовой статистики для электронов проводимости в металле позволяет развивать количественную теорию удельного электросопротивления (УЭС) металлов. Прогресс в развитии теории транспортных свойств металлов связан с развитием псевдопотенциальной теории. Существенно, что при исследовании электросопротивления не нужно знать закон дисперсии  $E(\mathbf{k})$  во всей зоне Бриллюэна, поскольку важны лишь электроны возбуждаемые термически. К ним относятся электроны с энергией порядка  $k_B T$  вблизи уровня Ферми.

Остальные электроны системы вследствие принципа Паули не участвуют в рассеянии. Использование псевдопотенциальной теории позволяет проводить расчеты электросопротивления и сплавов с учетом как статических, так и динамических искажений решетки. В работе исследуется возможность использования теории псевдопотенциалов, одноэлектронного приближения, сферической поверхности Ферми, линейной теории экранирования для моделирования температурной зависимости УЭС щелочных и щелочноземельных металлов.

В работе проведен расчет температурной части электросопротивления  $\rho_T$  щелочных и щелочноземельных металлов с помощью гладкого нелокального модельного потенциала (ГНМП) в приближении второго порядка теории возмущения и линейной теории экранирования при идеальной кристаллической структуре металла в гармоническом приближении для колебаний металлов можно выразить следующим образом (1-4)

$$\rho_T(\varphi_i) = K \int_0^2 S(x) |w(x, \varphi_i)|^2 x^3 dx, \quad x = \frac{q}{k_F}, \quad (1)$$

где  $K = \frac{3\pi m_e \Omega \cdot R_b^3 \cdot (2R_y)}{8he^2 E_F}$ ,  $\Omega$  - объем, приходящийся на атом в атомных единицах,  $E_F$  - энергия Ферми металла в атомных единицах,  $m_e$  - масса электрона в системе СИ,  $R_b$  - радиус Бора в системе СИ,  $R_y$  - энергия Ридберга в системе СИ,  $w(q, \varphi_i)$  псевдопотенциал металла, зависящий от вектора рассеяния и от угла рассеяния  $\varphi_i$  между векторами  $\mathbf{q}$  и  $\mathbf{k}$  в атомных единицах (см. рис.1).  $\rho_T(\varphi_i)$  - удельное сопротивление металла в системе

СИ в зависимости от температуры и от угла рассеяния  $\varphi_i$

$$S(q) = \frac{1}{4\pi} \int S(\mathbf{q}) d\hat{q} \quad (2)$$

здесь  $S(q)$  - безразмерный структурный фактор, усредненный по всем ориентациям вектора рассеяния  $\mathbf{q}$  (4-5)

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{m_A \beta} \sum_S \frac{|\mathbf{e}_{qS} \cdot \mathbf{q}|^2}{(e^{\beta\omega} - 1)(1 - e^{-\beta\omega})} \quad (3)$$

$\beta = k_b T$ ,  $k_b$  - постоянная Больцмана,  $T$  – температура Кельвина.

Расчеты УЭС с помощью ГНМП сравнивались с расчетами, основанными на квазилокальном потенциале Хейне-Абаренкова-Анималу (ХАА). На основании сравнения расчетов в различных приближениях был сделан вывод о важности учета нелокальности и гладкости псевдопотенциалов при расчете температурной зависимости УЭС простых металлов.

1. Харрисон У. Псевдопотенциалы в теории металлов. М.: Мир, 1968. 384С.
2. Харрисон У. Электронная структура и свойства твердых тел. Т. II. М.: Мир, 1968, 332С.
3. Займан Дж. Принципы теории твердого тела. М.: Мир, 1966. 416 С.
4. Khanna S.N., Iain Ashok Electrical resistivity of noble and transition metals using animalu's model potential. // J. Phys. Chem. 1971. 38. P.447-451.



5. Крисько О.В., Скоробогатова Т.В. Расчет температурной части электросопротивления алюминия с помощью гладкого нелокального модельного потенциала (ГНМП) простых металлов. // Современные проблемы науки и образования. 2014. №6. С.1711-1714.

## **УПРОРЯДОЧЕНИЕ В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ СИСТЕМЫ ЖЕЛЕЗО-РЕНИЙ**

**©2015 г. Л.Энхтор<sup>1</sup>, В.М. Силонов<sup>2</sup>**

*<sup>1</sup>Монгольский государственный университет, Факультет естественных наук, кафедра физики, <sup>2</sup>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, физический факультет, кафедра физики твердого тела  
enkhtor@mail.ru, silonov\_v@mail.ru*

В данной работе с использованием параметров ближнего порядка на первых четырех координационных сферах сплавов системы Fe-Re 3, 5 и 7 ат.%Re, экспериментально определенных методом диффузного рассеяния рентгеновских лучей (ДРРЛ), рассчитаны значения энергии упорядочения в приближении Каули. Для изучаемых сплавов выявлены концентрационные зависимости энергии упорядочения на первых четырех координационных сферах. Для этих сплавов рассчитаны значения энергии ближнего порядка.

Экспериментально определенные методом диффузного рассеяния рентгеновских лучей (ДРРЛ) [1] значения параметров ближнего порядка на первых четырех координационных сферах сплавов Fe - 3, 5 и 7 ат.%Re приведены в Таблице 1. Видно, что для всех трех сплавов значения параметров ближнего порядка на первой координационной сфере отрицательны по знаку. Это говорит о существовании ближнего порядка в твердых растворах железо - рений. Следует отметить, что с ростом содержания

рения от 3 до 7 ат.%Re наблюдается рост значений параметра  $|\alpha_1|$  более чем в два раза. При этом значения параметра  $\alpha_2$  также растут. Видно также, что для сплавов содержащих 3 и 5 ат.%Re значения параметра  $\alpha_3$  отрицательны, а для сплава 7 ат.%Re этот параметр меняет знак. Для всех сплавов значения  $\alpha_4$  положительны. В сплавах с 3 и 5 ат.% Re наблюдается чередование знаков параметров ближнего порядка, а в сплаве с 7 ат.%Re параметры ближнего порядка на второй, третьей и четвертой координационных сферах положительны. Все это говорит о сильной концентрационной зависимости параметров ближнего порядка в твердых растворах железо - рений.

Таблица 1.

Значения радиусов координационных сфер, параметров ближнего порядка и энергии упорядочения сплавов Fe-Re.

№ коор. сферы	Fe-3ат.%Re			Fe-5ат.%Re			Fe-7ат.%Re		
	$r, \text{Å}$	$\alpha_i$	$W, k_B$	$r, \text{Å}$	$\alpha_i$	$W, k_B$	$r, \text{Å}$	$\alpha_i$	$W, k_B$
1	2.491	-0.014	228.4	2.495	-0.022	208.6	2.499	-0.039	264.9
2	2.877	0.025	-261.5	2.881	0.028	-187.0	2.886	0.044	-185.1
3	4.068	-0.007	120.6	4.074	-0.005	54.1	4.081	0.000	29.6
4	4.770	0.006	-70.0	4.778	0.008	-62.3	4.785	0.003	-30.6

Расчет энергий упорядочения сплавов Fe-3, 5 и 7 ат.%Re проводился с использованием уравнений Ж.М. Каули [2] которые мы расписали для первых четырех координационных сфер в виде:

$$\ln \left\{ 1 + \frac{\alpha_1}{c_A \cdot c_B (1 - \alpha_1)} \right\} = - \frac{2}{k_B T} \{ (1 + 3\alpha_2 + 3\alpha_3 + \alpha_5) W_1 + (3\alpha_1 + 3\alpha_4) W_2 + (3\alpha_1 + 6\alpha_4 + 3\alpha_7) W_3 + (3\alpha_2 + 6\alpha_3 + 3\alpha_5 + 3\alpha_6 + 6\alpha_8 + 3\alpha_9) W_4 \};$$

$$\ln \left\{ 1 + \frac{\alpha_2}{c_A \cdot c_B (1 - \alpha_2)} \right\} = - \frac{2}{k_{BT}} \{ (4\alpha_1 + 4\alpha_4)W_1 + (1 + 4\alpha_3 + \alpha_6)W_2 + (4\alpha_2 + 4\alpha_5 + 4\alpha_8)W_3 + (4\alpha_1 + 8\alpha_4 + 8\alpha_7 + 4\alpha_{11})W_4 \};$$

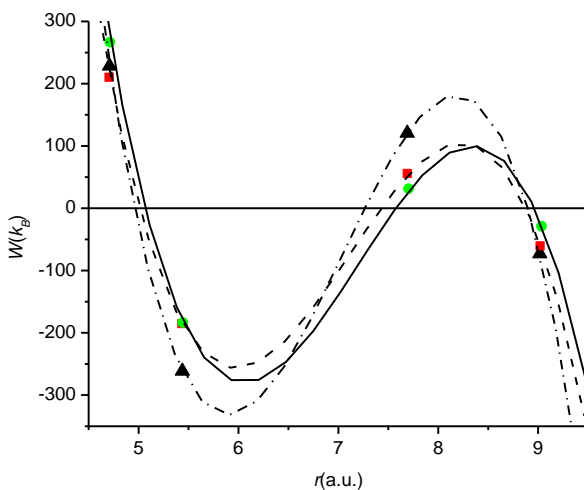
$$\ln \left\{ 1 + \frac{\alpha_3}{c_A \cdot c_B (1 - \alpha_3)} \right\} = - \frac{2}{k_{BT}} \{ (2\alpha_1 + 4\alpha_4 + 2\alpha_7)W_1 + (2\alpha_2 + 2\alpha_5 + 2\alpha_8)W_2 + (1 + 4\alpha_3 + 2\alpha_6 + 4\alpha_9 + \alpha_{12})W_3 + (4\alpha_1 + 6\alpha_4 + 4\alpha_7 + 4\alpha_{11} + 2\alpha_{10} + 4\alpha_{13})W_4 \};$$

$$\ln \left\{ 1 + \frac{\alpha_4}{c_A \cdot c_B (1 - \alpha_4)} \right\} = - \frac{2}{k_{BT}} \{ (\alpha_2 + 2\alpha_3 + \alpha_5 + \alpha_6 + 2\alpha_8 + \alpha_9)W_1 + (\alpha_1 + 2\alpha_4 + 2\alpha_7 + \alpha_{11})W_2 + (2\alpha_1 + 3\alpha_4 + 2\alpha_7 + \alpha_{10} + 2\alpha_{11} + 2\alpha_{13})W_3 + (1 + 2\alpha_2 + 3\alpha_3 + 2\alpha_5 + 4\alpha_8 + 4\alpha_9 + 2\alpha_{12} + 2\alpha_{14} + \alpha_{15} + 2\alpha_{16} + \alpha_{18})W_4 \};$$

(1)

Вышеприведенную систему линейных уравнений решали для каждого сплава Fe 3,5,7 ат.%Re с использованием экспериментально определенных параметров ближнего порядка на первых четырех координационных сферах по методу наименьших квадратов согласно методике, использованной в [1]. Рассчитанные спектры энергии упорядочения сплавов Fe-3,5,7 ат.%Re приведены в единицах постоянной Больцмана  $k_B$  в Таблице 1. Из данных таблицы можно заключить, что для всех сплавов значения энергии упорядочения с чередованием меняют знак с увеличением номера координационной сферы. Причем для сплавов Fe-3 и 5 ат.%Re это чередование знака согласуется с чередованием знаков параметров ближнего порядка. Модуль

значения энергии упорядочения на второй, третьей и четвертой сферах убывает с ростом концентрации рения. Для сплава Fe-3ат.%Re значение энергии упорядочения на второй сфере по модулю превосходит значение на первой сфере. Для сплава Fe 7 ат.%Re модуль значения энергии упорядочения убывает с увеличением номера координационной сферы. Для этого сплава значение энергии упорядочения первой сфере соответственно на 16% и 27% больше, чем значения для сплавов Fe- 3 и 5 ат.%Re. Под значения энергии упорядочения сплавов Fe-3,5,7 ат.%Re мы для каждого сплава подогнали кривые зависимости энергии упорядочения от межатомного расстояния с использованием полиномов третьей степени. Графики кривых приведены на Рисунке 1, откуда видно, что зависимости энергии упорядочения сплавов Fe-3,5,7 ат.%Re от межатомного расстояния имеют осциллирующий характер. Осциллирующий характер энергии упорядочения от межатомного расстояния был выявлен в сплавах Cu<sub>3</sub>Au [3], Ni<sub>3</sub>Al [4].



С использованием значений энергии упорядочения и параметров ближнего порядка мы рассчитали энергию ближнего порядка для каждого сплава Fe 3,5,7 ат.%Re по формуле:

$$E_{\text{БП}} = \sum_i c_i \alpha_i W_i, \quad (11)$$

где  $c_i$  – координационное число на  $i$ -той координационной сфере,  $\alpha_i$  – параметр ближнего порядка и  $W_i$  – энергия упорядочения на  $i$ -той координационной сфере. Значения энергии ближнего порядка для сплавов Fe-3,5,7 ат.%Re соответственно равны  $-85.4k_B$ ,  $-77.3k_B$  и  $-133.7k_B$ , из чего можно заключить, что в сплаве Fe-7 ат.%Re ближнее упорядочение играет наибольшую стабилизирующую роль.

#### **Список литературы**

1. *Силонов В.М., Энхтор Л.*// Вестник Московского Университета, Серия.3 ,1997 , С. 37-38.
2. *Cowley J.M.*// Phys.Rev.1950. V.77.P. 669
3. *Wilkins S.*// Phys.Rev. 1970. V. B2, N.10. P. 3935.
4. *Кацнельсон А.А., Дажаяев П.Ш.*// ФММ. 1974. 37. №3. С. 625.

### **ИЗМЕНЕНИЕ СВОЙСТВ ПОВЕРХНОСТИ СИЛУМИНА ПОСЛЕ ЭЛЕКТРОННО-ПУЧКОВОЙ ОБРАБОТКИ И МНОГОЦИКЛОВОГО УСТАЛОСТНОГО НАГРУЖЕНИЯ Алсараева К.В., Коновалов С.В., Громов В.Е., Иванов Ю.Ф.**

*Сибирский государственный индустриальный университет,  
Новокузнецк, Россия  
gromov@physics.sibsiu.ru*

Многие служебные характеристики промышленных материалов существенным образом зависят от состояния тонкого поверхностного слоя. Эффективным инструментом модификации структуры и свойств поверхностного слоя металлов и сплавов являются высокоинтенсивные электронные пучки

субмиллисекундной длительности воздействия, позволяющие модифицировать структуру поверхностного слоя толщиной в десятки микрометров [1].

В работах [2-4] было показано, что обработка поверхности силумина высокоинтенсивным импульсным электронным пучком (ЭПО) сопровождается кратным (более чем в 3,5 раза) увеличением усталостной долговечности этого материала. Очевидно, что деформационное воздействие, имеющее место при усталостных испытаниях, будет способствовать преобразованию структуры и свойств материала. В связи с этим целью данной работы являлось исследование изменений структуры, фазового состава и свойств поверхностного слоя силумина, подвергнутого обработке импульсным электронным пучком.

В качестве материала исследований был использован сплав Al-Si (силумин эвтектического состава). Усталостные испытания проводили по схеме циклического асимметричного консольного изгиба [5]. Облучение поверхности образцов, приготовленных к усталостным испытаниям, осуществляли на установке «СОЛО» [1] при следующих параметрах: энергия электронов 16 кэВ; частота следования импульсов  $0,3 \text{ с}^{-1}$ ; длительность импульса пучка электронов 150 мкс; плотность энергии пучка электронов (15 и 20) Дж/см<sup>2</sup>; количество импульсов воздействия 1, 3, 5.

При ЭПО эвтектического силумина в оптимальном режиме (20 Дж/см<sup>2</sup>; 150 мкс; 5 имп.) достигается более чем трехкратное увеличение усталостной долговечности [13]. Основной причиной такого эффекта является диспергирование и квазиоднородное распределения кремния в модифицированном ЭПО слое.

Согласно результатам трибологических испытаний силумина минимальной скоростью изнашивания обладают образцы, прошедшие усталостные испытания в течение 132000 циклов. После 574000 циклов усталостных испытаний скорость изнашивания материала возрастает, однако остается ниже

относительно показателей, зафиксированных для исходного материала (необлученного материала перед усталостными испытаниями). Практически подобным образом изменяется и величина коэффициента трения. Установлено, что увеличение числа циклов усталостного нагружения с 132000 до 574000 приводит к снижению твердости в  $\approx 4,5$  раза и снижению модуля Юнга (в  $\approx 3-4$  раза) поверхностного слоя материала.

Очевидно, что подобные изменения трибологических и прочностных характеристик материала вызваны изменением структуры поверхностного слоя силумина в процессе усталостных испытаний.

Облучение поверхности силумина высокоинтенсивным импульсным электронным пучком в режиме плавления и последующей высокоскоростной кристаллизации сопровождается формированием структуры ячеистой кристаллизации, имеющей двухфазное строение. Структура сформирована слоями твердого раствора на основе алюминия с размерами ячеек 450 нм, разделенными прослойками кремния с поперечными размерами 80 нм.

Усталостные испытания приводят к существенному преобразованию структуры высокоскоростной кристаллизации. При сравнительно малом количестве циклов нагружения (132000 циклов) структура ячеистой кристаллизации сохраняется, однако существенным образом модифицируется состояние прослоек кремния (рис. 1, а). Во-первых, увеличиваются поперечные размеры прослоек. Во-вторых, прослойки кремния разбиваются на отдельно расположенные частицы размерами в пределах (15-30) нм. Микроэлектрограммы, полученные с прослоек кремния, имеют кольцевое строение (рис. 1, б), что указывает на наноструктурное состояние прослоек, т.е. формирование отдельно расположенных частиц кремния наноразмерного диапазона. Наноразмерные частицы кремния выявляются как на

границе раздела ячеек алюминия, так и в объеме ячеек (рис. 1, в). Последнее может указывать на вынос кремния в атомарном виде или в виде наноразмерных частиц из прослоек в объем ячеек. В объеме ячеек кристаллизации присутствует дислокационная субструктура в виде отдельно расположенных дислокаций со скалярной плотностью  $\approx 2 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ .

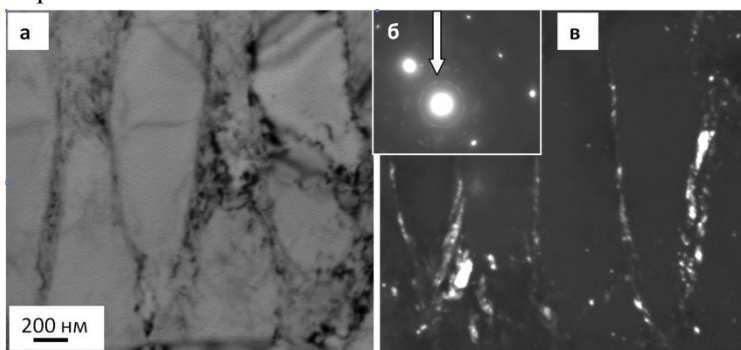


Рис. 1. ПЭМ изображение структуры силумина, подвергнутого обработке по режиму (20 Дж/см<sup>2</sup>; 150 мкс; 1 имп.) и последующему усталостному нагружению до разрушения при 132000 циклах; а – светлопольное изображение; б – микроэлектроннограмма, стрелкой указан рефлекс, в котором получено темнопольное изображение; в – темнопольное изображение, полученное в рефлексе [111] Si.

Структура поверхностного слоя силумина после 574000 циклов нагружения представлена на рис. 2. Отчетливо видно, что деформационное воздействие, имеющее место при многоциклового усталости, приводит не только к наноструктуризации прослоек кремния, расположенных по границам ячеек алюминия, подобно наблюдаемому при числе циклов нагружения 132000, но и к частичному (рис. 2) или полному разрушению структуры ячеистой кристаллизации.



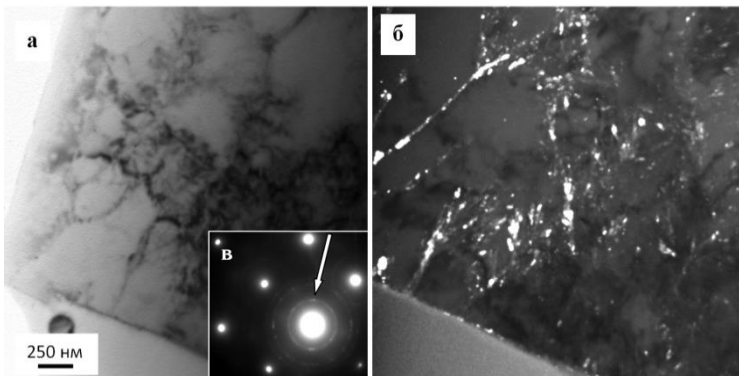


Рис. 2. ПЭМ изображение структуры силумина, обработанного интенсивным импульсным электронным пучком (20 Дж/см<sup>2</sup>; 150 мкс; 5 имп.) и разрушенного при 574000 циклах усталостного нагружения; а – светлое поле; б – темное поле, полученное в рефлексе первого дифракционного кольца типа (111)Si; в – микроэлектронграмма, стрелкой указан рефлекс, в котором получено темное поле (б).

Структура приповерхностного слоя силумина, подвергнутого многоцикловым (574000 циклов) испытаниям, содержит микротрещины. Микротрещины расположены исключительно в пластинах кремния, не растворившегося при облучении электронным пучком, либо вдоль границы, разделяющей пластину кремния и зерно алюминия, что подчеркивает негативное влияние включений кремния пластинчатой морфологии на усталостную долговечность силумина.

Таким образом, выявлен режим облучения, позволяющий повысить усталостную долговечность эвтектического силумина более чем в 3,5 раза. Проведены исследования трибологических и прочностных свойств поверхности силумина, подвергнутого усталостным испытаниям, и выявлено снижение твердости, увеличение скорости изнашивания и коэффициента трения с ростом числа циклов усталостного нагружения. Выполнены исследования структурно-фазового состояния силумина,

подвергнутого усталостным испытаниям и установлено, что усталостное нагружение сопровождается разрушением структуры высокоскоростной кристаллизации сформированной при электронно-пучковой обработке. Высказано предположение, что это является одной из основных причин снижения прочностных и трибологических свойств поверхностного слоя силумина.

*Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых - докторов наук (проект МД-2920.2015.8) и государственного задания № 3.1496.2014/К.*

#### Литература

1. Ласковнев А.П., Иванов Ю.Ф., Петрикова Е.А. и др. Модификация структуры и свойств эвтектического силумина электронно-ионно-плазменной обработкой. Минск: «Белорусская наука», 2013. 287 с.
2. Иванов Ю.Ф., Алсараева К.В., Громов В.Е., Петрикова Е.А., Тересов А.Д., Ткаченко А.В. Повышение усталостного ресурса силумина при обработке высокоинтенсивным импульсным электронным пучком // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*, 2014. Т. 11. № 3. с. 281-284.
3. Громов В.Е., Алсараева К.В., Коновалов С.В., Иванов Ю.Ф., Бондаренко К.Ю. Влияние электронно-пучковой обработки на усталостную долговечность силумина // XIII международная конференция «Дислокационная структура и механические свойства металлов и сплавов – ДСМСМС-2014», Россия, Екатеринбург, 7-11 сентября 2014. с. 115.
4. Алсараева К.В., рук. Громов В.Е. Изменение усталостной долговечности силумина, обработанного высокоинтенсивным импульсным электронным пучком // III Международная научная школа для

молодежи «Материаловедение и металлофизика легких сплавов». Екатеринбург, УрФУ, 8- 12 декабря 2014. с. 131-134.

5. Соснин О.В., Громов В.Е., Козлов Э.В., Иванов Ю.Ф. Усталость сталей при импульсном токовом воздействии. Новокузнецк: Изд-во СибГИУ, 2004. 464 с.

## **ВЛИЯНИЕ ИОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ НА СВОЙСТВА НАНОМАТЕРИАЛОВ**

**Андриевский Р.А.**

*Россия, г. Черноголовка Московской области,  
Институт проблем химической физики РАН  
ara@icp.ac.ru*

Из общих соображений и имеющихся экспериментальных данных можно выделить по крайней мере три варианта поведения наноматериалов под облучением. 1. Наличие значительного количества поверхностей раздела (типа границ зерен и тройных стыков), могущих функционировать как сто-ки для удаления радиационных дефектов, приведет к повышению радиационной стабильности наноматериалов по сравнению с таковой для обычных крупнозернистых материалов. 2. Радиационное облучение может способствовать аннигиляции наноструктуры и её превращению в аморфное состояние. 3. Наличие радиационных дефектов может приводить к рекристаллизационным процессам, что будет накладывать свой отпечаток на описанные выше первый и второй варианты развития событий. В докладе подробно анализируются экспериментальные и теоретические данные по влиянию поверхностей раздела на поведение наноматериалов при ионном облучении [1]. Особенно показательны результаты

экспериментов по ионному облучению многослойных наноструктурных пленок типа Cu/V, Cu/Nb, Cu/W, W/ZrO<sub>2</sub>, Ta/Ti, Ag/Ni, CrN/AlTiN и др. Обращено внимание на возможности повышения радиационной стойкости в случае образования нанодвойниковых структур с низкоэнергетическими малоугловыми границами зерен.

1. Р.А. Андриевский. Наноструктуры в экстремальных условиях. Успехи физических наук, 184, № 10, 1017-1032 (2014).

## **ВЛИЯНИЕ ПРОТОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ 2.5 МэВ НА КРИТИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ВТСП ЛЕНТ ВТОРОГО ПОКОЛЕНИЯ**

**Антонова Л.Х.<sup>1</sup>, Демихов Т.Е.<sup>2</sup>, Троицкий А.В.<sup>1</sup>,  
Дидык А.Ю.<sup>3</sup>, Михайлова Г.Н.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН,*

<sup>2</sup>*Физический институт имени Лебедева РАН,*

<sup>3</sup>*ОИЯИ, Дубна*

*lraa@kapella.gpi.ru*

В связи с перспективой практического применения ВТСП магнитных систем в установках ускорительной техники исследования радиационной стойкости ВТСП композитов весьма актуальны. Известно, что критические параметры ВТСП лент второго поколения очень чувствительны к дефектности структуры. Одним из способов создания нанодфектов, которые являются эффективными центрами пиннинга, является облучение различными частицами (протонами, ионами), при котором увеличивается критический ток в ВТСП [2,3].

В данной работе исследовано влияние облучения протонами с энергией 2,5 МэВ на композитные высокотемпературные сверхпроводники (ВТСП) второго поколения на основе YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7</sub> (YBCO) и GdBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7</sub> (GdBCO). ВТСП-ленты имеют

сложную многослойную архитектуру. Расчеты SRIM [1] показали, что при энергии протонов 2,5 МэВ пробег протонов превышает 20 мкм и частицы достигают сверхпроводящего слоя. Облучение проводилось на ускорителях Ван-де-Граафа в Дубне и в НИИЯФ МГУ. Температура образцов во время облучения не превышала 100°С. Флюенсы протонов варьировались в интервале от  $6,1 \times 10^{14}$  p/cm<sup>2</sup> до  $1 \times 10^{17}$  p/cm<sup>2</sup>. Измерения критического тока  $I_c$  ВТСП-лент проводились резистивным методом.

При облучении протонами до  $6,2 \times 10^{15}$  p/cm<sup>2</sup> критический ток падает не более чем на 20% для лент на основе GdBCO, в то время как для образцов на основе YBCO такое же падение наблюдается при облучении до  $2,7 \times 10^{15}$  p/cm<sup>2</sup>. Эксперименты показали, что устойчивость сверхпроводника GdBCO к протонному облучению выше, чем у YBCO. Увеличения криттока при облучении протонами не наблюдалось как для лент на основе GdBCO так и на основе YBCO.

Авторы благодарят С.В.Самойленкова за предоставление образцов GdBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-x</sub>, а также А.П. Кобзева и В.С. Куликаускаса за проведение облучения.

1. Biersack J.P., Haggmark L.G. // Nucl. Instr. Meth. B, 1980, V. 74, p. 257-269; www.srim.org.

2. Jia Y, LeRoux M., Miller D.J., Wen J.G., Kwok W.K., Welp U., Rupich M.W., Li X., Sathyamurthy S., Fleshler S., Malozemoff A.P., Kayani A., Ayala-Valenzuela O. // Appl. Phys. Lett., 2013, V.103, 122601.

3. Антонова Л.Х., Белов А.Г., Воронов В.В., Дидык А.Ю., Демихов Е.И., Иванов Л.И., Мальгинов В.А., Михайлова Г.Н., Троицкий А.В.// Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2011, №5, с. 84-91.

**СЕЛЕКТИВНОЕ ЛАЗЕРНОЕ ПЛАВЛЕНИЕ  
АУСТЕНИТНОГО СПЛАВА  
Fe-17%Cr-12%Ni-2%Mo-1%Mn-0.7%Si-0.02%C**

**Базалева К.О., Цветкова Е.В.**

*Россия, Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана*

*bazaleevak@mail.ru*

Процесс селективного лазерного плавления (СЛП) основан на послышной выборочной лазерной перекристаллизации порошкового материала с целью создания профилей заданной формы, которые, в свою очередь, формируют весь объем детали. Известно, что в результате лазерной перекристаллизации возникают неравновесные структуры с отличным от стандартного уровнем свойств. Таким образом, при СЛП синтезируется объемный объект, особенности структуры и свойств которого имеют как большое практическое, так и научное значение.

В данной работе селективному лазерному плавлению подвергался порошок аустенитного сплава Fe-17%Cr-12%Ni-2%Mo-1%Mn-0.7%Si-0.02%C средней дисперсностью ~25 мкм. Мощность лазера составляла 50 Вт, скорость сканирования 100 мм/с, диаметр лазерного пятна 70 мкм. Процесс проводили в защитной среде азота, в качестве подложки использовали аустенитную сталь.

Фазово-структурное состояние сплава исследовалось методами металлографического анализа, растровой и просвечивающей электронной микроскопии и рентгеновской дифрактометрии. Термическая стабильность формирующихся структур изучалось с помощью дифференциальной сканирующей калориметрии. Также исследовались электрические и электрохимические характеристики объектов.

Было показано, что в процессе СЛП в сплаве формируется ячеистая структура с характерным диаметром ячейки  $\sim 0.5$  мкм; данная структура подобна деформационной: т.е. границы ячеек кристаллизации совпадают с деформационными ячейками, представляющими собой объемные сплетения дислокаций. Кроме того, методом рентгеновского микроспектрального анализа на фольгах была обнаружена химическая неоднородность в распределении Cr и Mo по объему ячейки: на границах концентрация этих элементов несколько выше. Предположительно, эта химическая неоднородность ответственна за высокую термическую стабильность ячеистой структуры, которая сохраняется до температуры порядка  $800^{\circ}\text{C}$ .

Методом дифференциальной сканирующей калориметрии обнаружены три экзотермических процесса при нагреве сплава до  $1200^{\circ}\text{C}$ : в интервалах температур от  $450$  до  $650^{\circ}\text{C}$ , от  $800$  до  $1000^{\circ}\text{C}$  и, наконец, от  $1050$  до  $1200^{\circ}\text{C}$ . Предположительно, первый эффект связан с уходом избыточных вакансий из решетки твердого раствора; второй – с гомогенизацией  $\gamma$ -твердого раствора и после ухода сегрегаций с границ ячеек перестройкой дислокационной структуры; и третий – с дегазацией твердого раствора. Газовые примеси могли раствориться в порошке аустенитного сплава при его хранении или в процессе СЛП. Следует отметить, что процесс, протекающий при  $1050\div 1200^{\circ}\text{C}$ , сопровождается существенным падением параметра кристаллической решетки аустенита, что косвенно подтверждает предположение о дегазации твердого раствора в этом температурном интервале.

Сравнительный анализ температурной зависимости электросопротивления стали, полученной СЛП методом, и эталонного образца, после СЛП подвергнутого дополнительному отжигу в течение  $10$  ч в вакууме при температуре  $1160^{\circ}\text{C}$ ,

показал, что остаточное электросопротивление после СЛП несколько выше (примерно на 12 %).

Коррозионные испытания аустенитного сплава, полученного СЛП, и эталонного образца в 1%-ном, 3%-ном и 5%-ном водных растворах NaCl показали, что селективное лазерное плавление не приводит к ухудшению электрохимических свойств сплава.

## **МОДИФИЦИРОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЕВ ТИТАНА VT1-0<sup>1</sup>**

**Башенко Л.П., Громов В.Е., Будовских Е.А., Иванов Ю.Ф.**

*Россия, Новокузнецк, Сибирский государственный*

*индустриальный университет*

*luda.baschenko@gmail.com*

Настоящая работа посвящена выявлению особенностей формирования структурно-фазовых состояний при электровзрывном легировании (науглероживании и карбоборировании) и последующей электронно-пучковой обработке (ЭПО) поверхности легирования технически чистого титана марки VT1-0.

Поверхностное легирование металлов и сплавов с использованием концентрированных потоков энергии (КПЭ) приводит к многократному повышению функциональных свойств титана и титановых сплавов, которые обладают низкой

---

<sup>1</sup> Исследование выполнено при финансовой поддержке Гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук МК-4166.2015.2 и – докторов наук МД-2920.2015.8, РФФИ в рамках научных проектов №№ 13-02-12009 офи\_м, 15-08-03411, 14-08-00506а, госзаданий Минобрнауки №№ 2708 и 3.1496.2014/К на выполнение научно-исследовательской работы.



износостойкостью, высокой склонностью к налипанию, большим коэффициентом трения в паре практически со всеми материалами [1, 2].

При электровзрывном легировании (ЭВЛ) в качестве легирующих добавок могут быть использованы порошки различных веществ; они вносятся в импульсную многофазную плазменную струю, сформированную из продуктов взрыва, и являются инструментом воздействия на обрабатываемую поверхность. Модифицирование структуры и свойств поверхностных слоев титана и титановых сплавов методом ЭВЛ (например, науглероживания и карбоборирования) заключается в формировании из продуктов электрического взрыва проводников импульсной многофазной плазменной струи, оплавлении ею поверхности и насыщении расплава компонентами струи, последующей его кристаллизации в условиях самозакалки с образованием новых фаз и соединений. Обработка приводит к многократному повышению различных физико-механических и эксплуатационных свойств. Исследования показывают, что упрочнение обуславливается, прежде всего, мелкодисперсными частицами вторых фаз (карбидных, боридных и др.), распределенными в вязкой металлической матрице. Вследствие импульсного характера обработки в зоне легирования сохраняются области структурно-свободных легирующих элементов, (например, углерода в форме графита или бора). В сформированной плазменной струе конденсированные частицы продуктов взрыва и порошковых навесок располагаются в тылу струи и поэтому достигают облучаемой поверхности, когда она уже оплавлена или даже после ее кристаллизации. Эти частицы формируют на облучаемой поверхности развитый рельеф, что может ограничивать область практического использования ЭВЛ. Это дает возможность осуществления дальнейшей модификации зоны обработки.

Электронно-пучковая обработка с использованием низкоэнергетических сильноточных электронных пучков осуществляется в импульсно-периодическом режиме, что позволяет, с одной стороны, увеличить время нахождения поверхностного слоя в расплавленном состоянии и гомогенизировать его элементный состав, а с другой, – сохранить закалочные эффекты, приводящие к формированию субмикро- и наноразмерной структуры.

Функциональные свойства поверхностных слоев определяются, прежде всего, особенностями их структуры и фазового состава. Наибольшего упрочнения удается добиться при поверхностном легировании. Структура, фазовый состав и свойства модифицированных слоев зависят от технологических особенностей используемых методов обработки и параметров воздействия на упрочняемую поверхность. Совместно использовать ЭВЛ и ЭПО возможно, так как эти виды обработки имеют сопоставимые значения поглощаемой плотности мощности, глубины и диаметра зоны воздействия, позволяют формировать новые структурно-фазовые состояния поверхностных слоев металлов и сплавов и расширить возможную область их практического использования. Такая комбинированная обработка позволяет значительно увеличить глубину зоны легирования, уменьшить шероховатость поверхности, уменьшить градиент микротвердости по глубине и внутренние напряжения на границе раздела ее с основой, повысить микротвердость и износостойкость поверхности упрочнения более чем в 3–5 раз, снизить коэффициент трения. Такая обработка обеспечивает наиболее полную реализацию всех упрочняющих механизмов. Изменяя технологические параметры процесса упрочнения в зависимости от конкретных целей и задач, можно получить оптимальное состояние структуры, обеспечивающее максимальный уровень конструктивной

прочности за счет твердорастворного упрочнения легирующими элементами, высокой плотности дислокаций и формирования сверхмелкозернистой структуры, полученных при высоких скоростях охлаждения, а также частицами вторых фаз.

В настоящей работе измерена микротвердость и проведены микроскопические исследования рельефа поверхности и структурно-фазовых состояний поверхностных слоев титана ВТ1-0 после ЭПО поверхности электровзрывного науглероживания. После науглероживания микротвердость имеет максимальное значение 800 *HV* на поверхности обработки и монотонно падает до 180 *HV* на глубине около 50 мкм. Ее повышение можно связывать, прежде всего, с образованием в зоне легирования упрочняющих частиц карбида титана. После ЭПО максимум микротвердости наблюдается уже не на поверхности, а на глубине около 20 мкм, при этом его величина достигает 2500 – 3000 *HV*. Таким образом, повышение микротвердости достигает 14 раз по сравнению с микротвердостью основы материала. Толщина упрочненного поверхностного слоя достигает 120 мкм. Науглероживание титана приводит к формированию на поверхности несплошного покрытия. Выделены три характерные составляющие структуры поверхности. При последующей ЭПО происходит выравнивание рельефа поверхности обработки, объединение покрытия с зоной легирования. Установлено, что упрочнение достигается вследствие образования карбида и боридов титана и формирования субмикро- и наноразмерной структуры.

1. Багаутдинов А.Я., Будовских Е.А., Иванов Ю.Ф., Громов В.Е. Физические основы электровзрывного легирования металлов и сплавов. – Новокузнецк: изд. СибГИУ, 2007. – 301 с.

2. Структура, фазовый состав и свойства поверхностных слоев титана после электровзрывного легирования и электронно-пучковой обработки / Ю.Ф. Иванов, В.Е. Громов, Е.А. Будовских и др. // Новокузнецк: «Интер-Кузбасс», 2012. – 435 с
3. Бащенко Л.П., Соскова Н.А., Иванов Ю.Ф., Тересов А.Д., Райков С.В., Будовских Е.А., Громов В.Е. Влияние электронно-пучковой обработки на структуру и микротвердость поверхности технически чистого титана ВТ1-0 после электровзрывного науглероживания // Фундам. проблемы соврем. материаловедения. 2012. Т. 9. № 1. С. 15–22.
4. Бащенко Л.П., Ефименко И.Т., Будовских Е.А., Иванов Ю.Ф., Иванов К.В., Ионина А.В., Громов В.Е. Особенности модифицирования поверхностных слоев титана при электровзрывном науглероживании // Физика и химия обраб. материалов. 2012. № 2. С. 65–69.

**О НЕКОТОРЫХ ЗАКОНОМЕРНОСТЯХ ВЛИЯНИЯ  
ЛЕГИРОВАНИЯ ГРАНУЛИРУЕМЫХ ЖАРОПРОЧНЫХ  
НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ НА ИХ МИКРОСТРУКТУРУ,  
ПРОЧНОСТЬ И ПЛАСТИЧНОСТЬ.**

**Бер Л.Б**

*Россия, Москва, ОАО «ВИЛС»*

*berfam@mail.ru*

В гранулируемом жаропрочном никелевом сплаве (ЖНС) ЭП741НП и в гранулируемых ЖНС класса ВВП методом микрорентгеноспектрального анализа (МРСА) определено преимущественное расположение легирующих компонентов замещения в  $\gamma$ - и  $\gamma'$ - фазах. Показано, что в ЖНС легирующие компоненты замещения с числом валентных электронов меньше

6 преимущественно находятся в  $\gamma'$ -фазе, а элементы с числом валентных электронов больше 5 преимущественно находятся в  $\gamma$ -фазе.

Сопоставление преимущественного положения легирующих компонентов замещения в  $\gamma$ - и  $\gamma'$ - фазах с их влиянием на значения периодов решётки  $\gamma$ - и  $\gamma'$ - фаз позволяет предсказать, в каком направлении при легировании будут меняться значения мисфита (несоответствия периодов решётки  $\gamma$ -фазы и  $\gamma'$ -фазы). Величину мисфита используют для оценки уровня межфазных напряжений и устойчивости частиц  $\gamma'$ -фазы в условиях эксплуатации ЖНС.

С помощью обратной съёмки на монохроматическом  $\text{CrK}\alpha$ -излучении в камере Дебая с эталоном из порошка W измерены периоды решётки  $\gamma$ -фазы и  $\gamma'$ -фазы и подсчитаны значения мисфита для сплава ЭП741НП ( $\delta = +0.007\%$ ), сплава ВВ750П ( $\delta = -0.017\%$ ), сплава ВВ751П ( $\delta = -0.17\%$ ), сплава ВВ752П ( $\delta = -0.23\%$ ).

Для сплава ЭП741НП величина мисфита оказалась очень низкой и положительной. Для сплава ВВ750П также наблюдается небольшая, но уже отрицательная величина мисфита. Отрицательная величина мисфита сплавов ВВ751П и ВВ752П на порядок выше, чем величина мисфита сплава ВВ750П. Меньший размер субмикроскопических частиц  $\gamma'$ -фазы в сплавах ВВ751П (рис. 1) и ВВ752П по сравнению со сплавом ЭП741НП может быть объяснён представленными здесь значениями мисфита. Повышенная дисперсность субмикроскопических частиц  $\gamma'$ -фазы в сплавах класса ВВП является одной из основных причин более высокой прочности этих сплавов, а различие во внутренних межфазных упругих напряжениях может быть одной из причин того, что сплавы класса ВВП по сравнению со сплавом ЭП741НП после термической обработки имеют более низкую пластичность при комнатной и рабочих температурах.

Закономерности преимущественного расположения легирующих компонентов замещения в  $\gamma$  и  $\gamma'$  фазах, обнаруженные в настоящей работе, а также зависимость мисфита от содержания указанных компонентов позволяют с помощью легирования целенаправленно регулировать прочность и пластичность ЖНС. Появляется возможность скорректировать химический состав гранулируемых ЖНС класса ВВП в направлении повышения их пластичности, при сохранении достигнутой прочности и жаропрочности. В наших дальнейших работах мы постараемся реализовать указанные возможности.

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИЗОТЕРМИЧЕСКИХ ТВП-  
ДИАГРАММ РАСПАДА  $\gamma$ -ТВЁРДОГО РАСТВОРА  
ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ ДЛЯ  
ОПТИМИЗАЦИИ ЗАКАЛОЧНОГО ОХЛАЖДЕНИЯ  
ЗАГОТОВОК ДИСКОВ В ВАКУУМНЫХ ПЕЧАХ**

**Бер Л.Б., Казберович А.М., Исаев М.А.**

*Россия, Москва, ОАО «ВИЛС»*

*berfam@mail.ru*

На основании изотермических температурно-временных диаграмм распада  $\gamma$ -твёрдого раствора гранулируемых жаропрочных никелевых сплавов (ЖНС) ЭП741НП и ВВ751П прослежена связь морфологии субмикронных и наноразмерных частиц  $\gamma'$ -фазы с температурно-временным маршрутом закалочного охлаждения и с комплексом свойств заготовок дисков. Даны рекомендации по оптимизации маршрутов закалочного охлаждения с включением участков ускоренного охлаждения.

В настоящее время в ОАО «ВИЛС» осваивается новое промышленное термическое оборудование. Благодаря использованию особого газообразного теплоносителя (гелия),

при закалке полноразмерных заготовок дисков из ЖНС впервые в мире удалось получить скорости закалочного охлаждения, в несколько раз превышающие скорости закалочного охлаждения, достигаемые при закалке дисковых заготовок спокойным или принудительно движущимся воздухом по традиционной технологии. При высоких скоростях закалочного охлаждения за счёт измельчения субмикроскопических выделений  $\gamma'$ -фазы повышаются прочностные свойства, но из-за высоких закалочных напряжений возникает опасность образования трещин.

В настоящее время в процессе отработки технологии закалки реальных заготовок на новом термическом оборудовании опробовано закалочное охлаждение по особым температурно-временным маршрутам, которые являются “know-how” процесса термической обработки. Указанная технология позволила гарантированно изготавливать заготовки дисков без трещин и недопустимых поволоков. Опробованные режимы термической обработки полноразмерных заготовок включают предшествующую закалочному охлаждению обработку на твёрдый раствор и последующее после закалочного охлаждения старение с сохранением стандартных температурно-временных параметров для данного сплава.

Полученные значения механических свойств и эксплуатационных характеристик материала дисковых заготовок из сплава ЭП741НП, термически обработанных с применением инновационных технологий, имеют значительные квоты превосходства перед уровнем характеристик заготовок, приобретённым в результате закалки по традиционной технологии. Особо следует отметить, что длительная прочность образцов с надрезом при температуре 750 °С и напряжении 750 МПа составила более 100 ч.

В работе представлены примеры микроструктуры заготовок, термически обработанных по традиционным и инновационным

режимам. Отмечены особенности морфологии выделений  $\gamma'$ -фазы в сплаве ЭП741НП после термической обработки с применением инновационных технологий. К ним относятся уменьшенный размер кубоидных частиц  $\gamma'$ -фазы в объеме зёрен (способствует повышению прочности) в сочетании с увеличенным размером частиц  $\gamma$ -фазы на границах зёрен (стабилизирует значения долговечности при испытаниях образцов с надрезом при 650 °С); наблюдаемые в объеме зёрен конгломераты крестообразной формы из субмикроскопических кубоидных выделений  $\gamma'$ -фазы. Дано объяснение происхождения таких конгломератов.

## ФАЗОВЫЕ СОСТОЯНИЯ В СИСТЕМЕ $Bi-Te$

Антошина И.А.

*Россия, г.Обнинск, ИАТЭ НИЯУ МИФИ*

Твердые растворы на основе теллурида висмута обладают высокими термоэлектрическими свойствами и широко используются при создании высокопроизводительных термоэлементов, работающих в области температур 200-500К.

Варьированием отклонения от стехиометрического состава  $Bi_2Te_3$  и параметров технологии получают образцы с разным типом проводимости как  $n$ -типа, так и  $p$ -типа. Избыток  $Te$  создает донорные уровни в полупроводниках  $n$ -типа, а избыток  $Bi$  создает акцепторные уровни в полупроводниках  $p$ -типа.

Целью работы являлось установление связи между структурным состоянием твердого раствора на основе теллурида висмута и его свойствами.

Образцы теллурида висмута, полученные методом экструзии, представляют собой слитки, образованные микрокристаллами  $Bi_2Te_3$ , преимущественно ориентированными в направлении [110]. Экструзия приводит к расслоению фазы  $Bi_2Te_3$  для образцов с  $p$ -типом проводимости. Из однофазной области



система переходит в двухфазную область с выделением мелкодисперсной эвтектики. Продемонстрирована возможность использования метода ДСК для определения избытка/недостатка компонентов  $Bi/Te$  в соединении  $Bi_2Te_3$ , а следовательно для определения типа проводимости термоэлектрических материалов на основе  $Bi_2Te_3$ .

Установлена корреляция термоэлектрических и прочностных характеристик теллурида висмута в различных структурных состояниях.

## **УТОЧНЕНИЕ СТРУКТУРЫ ГИДРОКСИАПАТИТА КАЛЬЦИЯ ПОЛУЧЕННОГО МЕТОДОМ ГИДРОЛИЗА**

**Бобров И.П.**

*Россия, г.Обнинск, ИАТЭ НИЯУ МИФИ*

*Иya.bobr.90@mail.ru*

Благодаря уникальным свойствам кальций-фосфатных материалов и прежде всего апатитов кальция существует широкий спектр их реализованных применений как в приборостроении (люминофоры, пьезоэлектрики, сорбенты для хроматографии), так и в медицине (пищевые добавки, материалы для имплантации, сорбенты тяжелых металлов и радионуклидов). Особое место среди материалов данного класса занимает гидроксиапатит  $Ca_5(PO_4)_3(OH)$  (ГА), рассматриваемый с некоторыми допущениями как кристаллохимический аналог минеральной составляющей тканей скелета и успешно применяемый в качестве базового компонента синтетических материалов.

В настоящее время существуют различные способы синтеза гидроксиапатита, такие как осаждение из раствора, спекание, гидролиз и др. Недавно сообщалось, что один из способов синтеза порошков гидроксиапатита основан на использовании

процесса гидролиза брушита (дикальцийфосфата дигидрата, ДКФД) в водном растворе ацетата натрия при температуре 60°C. Особенности структуры и свойства, полученных в результате гидролиза порошков ГА, наличие в них различного типа дефектов в сильной степени зависят от завершенности превращения образующегося на начальной стадии гидролиза октакальциевого фосфата (ОКФ), в ГА.

В настоящей работе рентгеновскими методами исследована структура порошков гидроксиапатита, полученных осаждением из раствора (ГА1), спеканием (ГА2) и в процессе гидролиза ДКФД (ГА3). Рентгеноструктурный анализ проводился в 2 этапа: получение рентгеновского спектра на дифрактометре UltimaIV фирмы Rigaku (Cu-K $\alpha$ ), затем, уточнение структуры методом Ритвельда с использованием программного комплекса JANA2006.

При рентгенодифракционных исследованиях дефекты, проявляющиеся в уширении дифракционных линий интерпретируются в рамках представлений об измельчении микроблоков (ОКР) и возникновении микроискажений ( $\Delta$ ).

Все дифракционные линии на дифрактограммах исследованных образцов индцировались в Пр. Гр.  $R6_3/m$  как рефлексы, принадлежащие фазе  $Ca_5(PO_4)_3(OH)$ . Дифракционные пики образца, полученного гидролизом, были сильно размыты. При уточнении структуры гидроксиапатита, присутствующего в различных образцах, на первом этапе оптимизировали параметры, описывающие профили рентгеновских рефлексов. Первая итерация позволяла уточнить общие для всех фаз параметры: фон, позицию нулевой точки, параметры приведения к абсолютной шкале. Форма дифракционных пиков описывалась функцией Псевдо-Фойгта с уточняемыми коэффициентами. Поправки на присутствие текстуры типа (001) вводили с помощью функции Марча-Долласа. Далее уточняли периоды решетки и коэффициенты уравнения, описывающие асимметрию

рефлексов. После этого проведено уточнение атомных координат, тепловых поправок и коэффициентов заполнения структурных позиций. Факторы сходимости составляли: 6,99, 6,59, 2,90 для образцов ГА1, ГА2 и ГА3 соответственно. Получены следующие периоды решеток:  $a=9.4052$ ,  $c=6.8985$  (ГА1);  $a=9.4231$ ,  $c=6.8866$  (ГА2);  $a=9.4496$ ,  $c=6.8801$  (ГА3).

Как следует из эксперимента тепловые поправки кислорода группы  $\text{OH}^-$  сильно увеличены, что указывает на размытие положений этих атомов вдоль оси  $c$ .

Структуру ГА уточняли в Пр. Гр.  $R\bar{6}_3/m$ , где фосфор занимает одну, кальций – две, а кислород три структурно-эквивалентные позиции.

Структура  $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3(\text{OH})$  характеризуется наличием двух вертикальных бесконечных структурных элементов: колонн, образованных атомами кислорода O1, O2, O3 треугольных призм, имеющих общие треугольные грани (эти призмы представляют собой координационные многогранники катионов Ca1, в которых кальций имеет шесть коротких  $d_{\text{Ca-O}} \sim 2.6 \text{ \AA}$  и три длинных  $d_{\text{Ca-O}} \sim 2.8 \text{ \AA}$  связи) и каналов, сформированных треугольниками из катионов Ca2, расположенных в базисных плоскостях с  $z = 1/4$  и  $z = 3/4$ , с винтовыми осями  $b_3$  в их центре и атомами кислорода O3.

Указанные вертикальные элементы связаны между собой фосфатными тетраэдрами  $\text{PO}_4$ . Поскольку центры тетраэдров (заполненные атомами фосфора) и две их кислородные вершины (O1 и O2) находятся в плоскостях  $z = 1/4$  и  $z = 3/4$ , они образуют горизонтальные слои, связанные между собой взаимодействиями  $\text{O}-\text{Ca1}-\text{O}$ .

Структура стехиометрического ГА описывается Пр.Гр.  $R2_1/b$ . В ней группы  $\text{OH}^-$ , расположенные в каналах, находятся несколько ( $\sim 0,05 \text{ \AA}$ ) выше и ниже положений, определяемых координатами  $z=1/4$  и  $z=3/4$ . Эти смещения вверх и вниз чередуются при трансляциях на период гексагональной решетки в

направлении оси  $b$ , вследствие чего величина трансляционного вектора  $b$ , увеличена в два раза, по сравнению с Пр.Гр.  $R6_3/m$ ,  $b=2a$ . Удвоенной элементарной ячейке соответствует химический состав, отвечающий формуле  $Ca_{10}(PO_4)_6(OH)_2$ . При наличии вакансий в позициях  $OH^-$ , распределенных статистически, различия между моноклинной и псевдогексагональной структурами становятся незначительными. В связи с этим было проведено уточнение структуры спеченного порошка ГА в моноклинной сингонии (Пр.Гр.  $P2_1/b$ ).

Из результатов исследования следует, что параметры кристаллической структуры и атомные параметры для ГА в образцах ГА1 и ГА2 близки по своим значениям тем, которые приведены в литературе для лучших образцов гидроксипатита. Значения атомных параметров ГА в образце, полученном гидролизом несколько отличаются от этих значений, что приводит к искажению кристаллической решетки, прежде, всего тетраэдров  $PO_4$ . Как следует из значений профильных параметров, полученных при уточнении структуры ГА3, основной вклад в уширение рентгеновских пиков вносит измельчение блоков когерентного рассеяния ( $\sim 300\text{\AA}$ ). Обнаружен дефицит по кальциевым позициям Ca1 (0.30619) и Ca2 (0.447587), обусловленный, прежде всего, частичным замещением атомов кальция атомами натрия, присутствующими в растворе, что подтверждается данными ОЭС.

Таким образом, гидроксипатит, полученный гидролизом, характеризуется дефектной, развитой субструктурой. Такие материалы, как известно, обладают повышенной растворимостью, лучше адаптируются в условиях человеческого организма и могут рассматриваться как перспективный биомедицинский препарат.

**ИЗМЕНЕНИЕ СОСТАВА И СТРУКТУРЫ  
ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЕВ СТАЛИ Ст3 С  
НАНЕСЕННЫМ ПОКРЫТИЕМ МЕТОДОМ ИОННО-  
ЛУЧЕВОГО ПЕРЕМЕШИВАНИЯ**

**Быков П.В., Воробьев В.Л., Баянкин В.Я.**

*Россия, г. Ижевск, ФТИ УрО РАН*

*less@ftiudm.ru*

При трении процесс разрушения локализован в поверхностных слоях материала. Поэтому с появлением новых технологий, осуществляющих воздействие на поверхность, встала задача их эффективного применения для поверхностного упрочнения деталей машин [1]. К таким способам относятся различные процессы нанесения покрытий. Совмещение процесса нанесения покрытий с ионной имплантацией может увеличить толщину упрочненного слоя и его физико-механические и эксплуатационные свойства [2].

Целью данной работы являлось исследование влияния облучения ионами аргона с различными энергиями на формирование состава и структуры поверхностных слоев, изменение морфологии и механических свойств (микротвердость и износостойкость) углеродистой стали Ст3 с нанесенным ионно-плазменным покрытием Cr и Ni<sub>80</sub>Cr<sub>20</sub>.

### **Литература**

Тушинский Л.И. Теория и технология упрочнения металлических сплавов. Новосибирск: Наука. Сиб. Отд-ние, 1990. 306 с.

Костюк Г.И., Бруяка О.О., Кот Н.И. *Вестн АИНУ*. (1) 25 (2009).

**ВЛИЯНИЕ ИОННО-ЛУЧЕВОГО ПЕРЕМЕШИВАНИЯ  
НА ФОРМИРОВАНИЕ СОСТАВА ПОВЕРХНОСТНЫХ  
СЛОЕВ ПРОКАТАННЫХ ТИТАНОВЫХ ФОЛЫГ С  
НАПЫЛЕННЫМ СЛОЕМ АЛЮМИНИЯ**

**Быков П.В.<sup>1</sup>, Тарасенков А.Н.<sup>2</sup>,**

**Воробьев В.Л.<sup>1</sup>, Баянкин В.Я.<sup>1</sup>**

*<sup>1</sup>Россия, г. Ижевск, ФТИ УрО РАН*

*less@ftiudm.ru*

*<sup>2</sup>Россия, г. Зеленоград, НПКТЦ МИЭТ*

*A.Tarasenkov@tcen.ru*

Методы ионно-лучевой и ионно-плазменной обработки, имея ряд принципиальных преимуществ по сравнению с традиционными методами химико-термической обработки, получили активное развитие в области модификации поверхностных слоев металлов и сплавов с целью повышения их прочностных свойств. В дополнение к классическим преимуществам ионной обработки (возможность превышения предела растворимости, контроль глубины распределения примеси, возможности селективной обработки участков деталей и т.д.) в последнее десятилетие удалось добавить и совершенно новые методики воздействия на приповерхностные слои материалов. В частности, с помощью формирования на поверхности мишени, одного или нескольких слоев других материалов нанометрового диапазона толщин, и их последующей ионной обработкой высокоэнергетичными частицами, удалось сформировать новые соединения и фазы в поверхностных слоях. Полученные таким образом приповерхностные слои могут приобретать отличные от «материнских» предел прочности, текучести, ударную вязкость, трещиностойкость, коррозионную стойкость, износостойкость. Дополнительно, совмещение процесса нанесения покрытий с ионной обработкой позволяет

варьировать толщину модифицированного слоя, что впоследствии позволяет изменять его физико-механические и эксплуатационные свойства в некотором диапазоне значений.

Целью данной работы являлось исследование влияния облучения ионами аргона с различными дозами на формирование состава и структуры поверхностных слоев, изменение морфологии и механических свойств (микротвердость и износостойкость) промышленного титана BT1-0 с нанесенным ионно-плазменным и электроно-лучевым покрытием Al.

**МОДИФИКАЦИЯ СОСТАВА, СТРУКТУРЫ И ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СТАЛИ СТЗ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ УСКОРЯЮЩЕГО НАПРЯЖЕНИЯ В ПРОЦЕССЕ ИМПУЛЬСНОГО ОБЛУЧЕНИЯ ИОНАМИ  $CR^+$**

**Воробьев В.Л., Быков П.В., Баянкин В.Я.**

*Россия, г. Ижевск, Физико-технический институт*

*vasily\_1.84@mail.ru*

Эксплуатационные свойства металлов и сплавов (износостойкость, циклическая усталость и др.) определяются структурно-фазовым состоянием поверхностных слоев и их можно значительно улучшить путем модифицирования поверхности. Как известно для поверхностной обработки металлов и сплавов используется метод ионной имплантации. Важнейшей особенностью этого метода, в отличие от других методов ионно-вакуумной обработки, является минимальное изменение геометрических размеров изделия, возможность обработки при низкой температуре, что обеспечивает во многих случаях исключение коробления изделия. Однако трудность применения метода ионной имплантации связана с недостаточной изученностью процесса связи параметров имплантируемых ионов (энергия, плотность ионного тока, доза

облучения) с их концентрацией в твердом теле, а также с отсутствием методик выбора технологических режимов обработки. В связи с этим, целью данной работы являлось исследование влияния ускоряющего напряжения (20, 30, 40 кВ) в процессе импульсного облучения ионами  $\text{Cr}^+$  на состав приповерхностных слоев, микротвердость и морфологию поверхности углеродистой стали Ст3.

В результате исследования установлено уменьшение максимума концентрации ионно-легированного хрома от 22 до 13 ат.% с увеличением ускоряющего напряжения. Выявлено формирование в приповерхностных слоях оксидов  $\text{Cr}_2\text{O}_3$ ,  $\text{CrO}_2$ ,  $\text{CrO}_3$  и  $\text{FeO}$ ,  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ , содержание которых с увеличением ускоряющего напряжения уменьшается, что обусловлено ростом температуры образцов и более интенсивным распылением. Установлено увеличение микротвердости на 20% после облучения с ускоряющим напряжением 20 кВ. С увеличением ускоряющего напряжения значение микротвердости снижается до уровня, соответствующего значению микротвердости исходного образца, что является следствием термического и радиационно-стимулированного отжига генерируемых ионным облучением дефектов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ №14-02-31488 и РФФИ-урал\_a № 13-02-96002.



**ИЗМЕНЕНИЯ В ХИМИЧЕСКОМ СОСТАВЕ И  
ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЕ ПОВЕРХНОСТИ  
СПЛАВОВ Cu-Ni И Cu-Mn ПОСЛЕ ОБЛУЧЕНИЯ ИОНАМИ  
АРГОНА И КИСЛОРОДА**

**Воробьев В.Л., Бакиева О.Р., Мухгалин В.В.**

*Россия, г. Ижевск, Физико-технический институт*

*firan@mail.ru*

В импульсно-периодическом режиме проведена модификация поверхности сплавов Cu-Ni и Cu-Mn ионами аргона и кислорода. Параметры воздействия (энергия и доза облучения) выбраны с превышением значений, при которых ранее наблюдали существенные изменения в структуре и свойствах металлических сплавов на основе 3d-металлов. Проведено исследование атомной структуры модифицированных сплавов методом рентгеноструктурного анализа на  $\theta$ - $\theta$  дифрактометре D8 Advance (Bruker AXS) в геометрии параллельного и скользящего пучка с  $\text{CuK}\alpha$  излучением. Показано влияние типа ионного облучения на структурные изменения, происходящие в сплавах Cu-Ni и Cu-Mn.

Исследование изменений в химическом составе и химическом состоянии элементов сплавов в ионно-имплантированных слоях, в зависимости от типа ионов и параметров облучения, проведено методом рентгеноэлектронной спектроскопии на спектрометре SPECS,  $\text{MgK}\alpha$ -излучение (1253,6 эВ). Обработка данных проведена с помощью ПО CasaXPS.

Исследование изменений в локальной атомной структуре проведено с помощью XAFS- (X-ray Absorption Fine Structure) подобной методики, основанной на возбуждении внутреннего уровня атома вещества электронным ударом: EELFS (Extended Energy Loss Fine Structure) спектроскопии. Спектры протяженных тонких структур энергетических потерь электронов (EELFS) были получены на Оже-микроанализаторе Jamp-10S (JEOL).

Определены параметры локальной атомной структуры поверхностных слоев (~ 5 нм) сплавов до и после ионной модификации.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ №14-02-31488.

**ИЗМЕНЕНИЕ СОСТАВА, СТРУКТУРЫ И  
ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ АРМКО-ЖЕЛЕЗА,  
ЛЕГИРОВАННЫХ УГЛЕРОДОМ МЕТОДОМ ИОННО-  
ЛУЧЕВОГО ПЕРЕМЕШИВАНИЯ**

**Воробьев В.Л., Бакиева О.Р., Баянкин В.Я., Гильмутдинов  
Ф.З., Картапова Т.С.**

*Россия, г. Ижевск, Физико-технический институт  
vasily\_l.84@mail.ru*

Методами РФЭС, РСА и EELFS исследованы химический состав и структура тонких поверхностных слоев армко-железа, легированных углеродом методом ионнолучевого перемешивания. Тонкие (~25 нм) пленки графита на поверхности  $\alpha$ -Fe, полученные методом магнетронного напыления при температурах подложки 200 и 250 °С, облучены ионами  $\text{Ag}^+$  в импульсно-периодическом режиме ( $\tau=1$  мс,  $\nu=200$  Гц) с энергией 30 и 40 кэВ и дозами  $5 \cdot 10^{16}$  и  $10^{17}$  ион/см<sup>2</sup>. Облучение при выбранных режимах приводит к частичному распылению углеродного слоя и перемешиванию компонентов покрытия и подложки через границу раздела. По данным РФЭС формируется протяженный (~ 20 нм) переходный слой переменного состава, в котором наблюдается химическое взаимодействие углерода и железа с образованием химических связей С-Fe, характерных для карбидов железа. Степень перемешивания и доля углерода в связи С-Fe зависят от температурных условий получения пленок и параметров воздействия (энергия, доза). Рентгеноструктурными

исследованиями выявлено образование структурных неоднородностей по слою перемешивания, а также образование структуры цементита в переходной области «пленка-металл». Твердость тонких (~70 нм) поверхностных слоев полученных покрытий, определенная методом наноиндентирования, превышает соответствующее значение для исходного армко-железа на 30%.

При выбранных параметрах ионнолучевого воздействия вблизи поверхности покрытия сохраняется сверхтонкий слой, состоящий преимущественно из углерода. Локальная атомная структура этого слоя отличается от структуры, характерной для графита. Длины химических связей С-С в первой координационной сфере, определенные методом EELFS-спектроскопии, превышают соответствующее значение, характерное для структуры графита.

Исследовано коррозионно-электрохимическое поведение поверхностных слоев армко-железа, легированных углеродом методом ионнолучевого перемешивания.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ №14-02-31488 и РФФИ-урал\_a № 13-02-96002.

## **ВЛИЯНИЕ ИМПЛАНТАЦИИ КИСЛОРОДА НА КОРРОЗИОННО-ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЖЕЛЕЗА**

**Воробьев В.Л., Решетников С.М., Гильмутдинов Ф.З.,  
Борисова Е.М., Бакиева О.Р.**

*Россия, г. Ижевск, Физико-технический институт  
vasily\_1.84@mail.ru*

Ионная имплантация является одним из весьма эффективных методов целенаправленного воздействия на поверхность металлов и сплавов [10, 11]. Многочисленные исследования

направлены на создание поверхностных слоев с повышенной твердостью, износостойкостью, жаропрочностью. Показано, что метод ионной имплантации может быть успешно использован и для повышения коррозионной стойкости материалов. Несмотря на значительное количество работ в этой области, влияние имплантации кислорода на коррозионные свойства материалов изучено недостаточно. При облучении кислородом, в зависимости от параметров воздействия, в поверхностных слоях облучаемого материала возможно создание нестехиометрических метастабильных фаз и оксидных структур, отличных от равновесных, формируемых в обычных условиях по диффузионному механизму, и определяющих физико-химические свойства модифицированного слоя.

В настоящей работе методом РФЭС изучено распределение кислорода и характер химических связей в поверхностных слоях образцов армко-железа, облученных ионами  $O^+$  с энергиями 10 и 30 кэВ с дозой  $10^{17}$  ион/см<sup>2</sup> в импульсно-периодическом режиме с длительностью импульсов 1 мс и частотой следования 100 Гц, плотностью тока в импульсе 100 мкА/см<sup>2</sup>. Показано, что оксидные слои, включая фазовые оксиды, располагаются в слое толщиной более 20 и 30 нм для образцов с энергией облучения 10 и 30 кэВ соответственно. При этом образуются оксиды железа переменного состава и различные формы адсорбированного и абсорбированного кислорода. Указанные кислородные образования способствуют переводу поверхности железа в более коррозионностойкое, пассивное состояние.

Методом снятия анодных потенциодинамических кривых в нейтральных и слабощелочных боратных буферных растворах изучено коррозионно-электрохимическое поведение образцов железа-армко, подвергнутых бомбардировке ионами кислорода. Показано, что ионная имплантация улучшает пассивацию образцов, при этом с ростом энергии ионов пассивационные

свойства поверхности усиливаются. Образец, облученный с энергией 30 кэВ, сразу же демонстрирует низкие токи, характерные для пассивного состояния и практически не имеет участка активного растворения. Токи анодного растворения существенно сокращаются как в области потенциалов условно активного растворения, так и в пассивной области. Повышение рН среды способствует облегчению перехода железа в пассивное состояние. После ионной имплантации с энергией не менее 30 кэВ образец изначально имеет пассивационный слой, не разрушаемый катодной поляризацией. Депассивирующее действие ионов хлорида при наличии пассивационного слоя значительно меньше, чем в случае адсорбционных слоев, образованных самопроизвольно или в ходе анодной поляризации в нейтральных электролитах. Для ионно-модифицированных образцов характерно более позднее наступление перепассивации.

Таким образом, показано, что имплантация ионов кислорода в поверхность железа (нелегированных сталей) может рассматриваться как перспективный метод повышения коррозионной стойкости этих материалов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ №14-02-31488.

## **ОСОБЕННОСТИ ДЕФОРМАЦИОННО–СИЛОВЫХ СВОЙСТВ «МЕТАЛЛИЧЕСКИХ МЫШЦ» ИЗ СПЛАВА TiNi**

**Вьюненко Ю.Н.**

*ООО «Оптимикст Лтд», Санкт-Петербург*

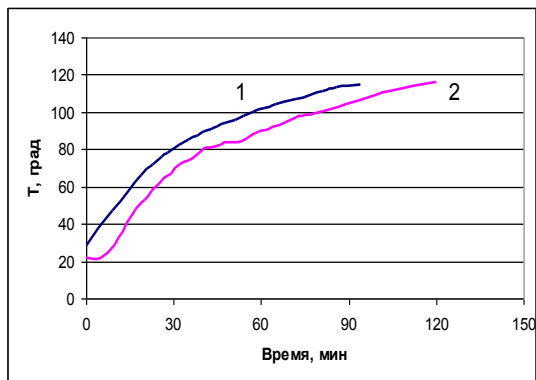
*vjunenko@math.spbu.ru*

Возможность смены направлений деформационных процессов в сплаве TiNiCu в области температур превращения была продемонстрирована в работах [1, 2]. Аналогичное явление

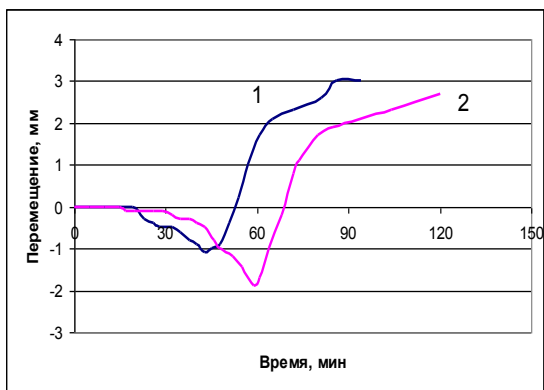
обнаружено при изучении работы «металлических мышц», выполненных в виде кольцевых силовых пучковых элементов (КСПЭ) [3]. Предваряя формоизменение, связанное с эффектом памяти формы, в обоих случаях в присутствии внешней нагрузки наблюдается деформирование образцов и изделий в направлении силового воздействия. Эффект памяти формы развивает изменение геометрии КСПЭ в противоположном направлении, т.е. в условиях силового противодействия. В отличие от экспериментов, описанных в [1,2], немонотонность деформационных процессов в «металлических мышцах» зафиксирована после предварительного необратимого формоизменения (величина деформации  $\sim 2\%$ ) в низкотемпературном состоянии.

Повышение силового воздействия на КСПЭ приводит к росту величины деформации по направлению действия силы, что согласуется с результатами работ [1, 2]. Однако существенное влияние на это явление оказывает скорость изменения температуры. На рис.1, 2 показаны временные зависимости температуры и деформационной характеристики КСПЭ, иллюстрирующие данный факт.

Использование «металлических мышц» данной конструкции в технологических процессах инициирует поиск путей повышения их силовых возможностей. Такой эффект может быть получен при деформировании КСПЭ в условиях развития в материале пластичности превращения в процессе охлаждения. Таким образом, удалось добиться повышения генерируемых усилий на 23,5% по сравнению с результатом, полученным после активного деформирования силового элемента в низкотемпературной фазе.



**Рис.1.** Зависимость температуры от времени при «быстром» (1) и «медленном» (2) нагревах печи



**Рис.2.** Зависимость перемещения контрольной точки КСПЭ [3] при «быстром» (1) и «медленном» (2) нагревах

1. Кузьмин С.Л. Память формы и пластичность превращения в металлах. // Дис. канд. физ-мат. наук. Л.: ЛГУ, 1980

2. Захарова Н.Н., Кузьмин С.Л., Лихачев В.А. Большие обратимые деформации и пластичность превращения в композиции TiNiCu. // Металлофизика, 1981. – Т.3, №5. – С.53-63
3. Ю.Н.Вьюненко. Исследование механических характеристик силовых элементов из материалов с ЭПФ// Вестник ТГУ, 2013. - Т.18, вып. 4. – С. 2023-2024.

## **ГИДРОФИЛЬНОСТЬ И ИК-СПЕКТРОСКОПИЯ АДСОРБИРОВАННОЙ ВОДЫ**

**Степанов В.А, Горчаков К.А.**

*Россия, Обнинск, ИАТЭ НИЯУ МИФИ  
gorchakov85@yandex.ru*

Молекулы воды и ионы гидроксила присутствуют в структуре многих органических соединений, значительно влияя на их свойства, в том числе и на физико-химические процессы взаимодействия с водой как растворителем. Начальная стадия растворения в воде кристаллических соединений, особенно сложных органических, зависит от характера взаимодействия воды с поверхностью органических кристаллических веществ, от гидрофильности поверхности и от состояния адсорбированной воды на поверхности.

В данной работе рассматриваются ИК-спектры воды, взаимодействующей с различными веществами, а также колебательные спектры гидроксилсодержащих групп и кристаллизационной воды.

В результате анализа известных экспериментальных данных установлена связь степени гидрофильности поверхности и структурного состояния адсорбированной воды. На характер такого взаимодействия влияют структура вещества, непосредственно тип связей (полярные или неполярные), состояния его поверхности (гидрофильная или гидрофобная), угол смачивания, поверхностная энергия и т.д. Эти факторы влияют на силу водородной связи О-Н...О между молекулами. С увеличением силы водородной связи происходит смещение полосы поглощения валентных колебаний ОН-связей в сторону меньших частот. Гидрофильность поверхности растворимого



материала определяет, как его растворимость в воде, так и структурное состояние воды на его поверхности. Чем больше высокочастотный сдвиг валентных колебаний в ИК-спектрах адсорбированной воды, тем слабее водородная связь в промежуточном слое воды, тем эффективнее взаимодействие монослоя воды с поверхностью, тем гидрофильнее материал.

Установлено, что с увеличением полярности материала (диэлектрической проницаемости) растет гидрофильность поверхности. Одновременно с этим увеличивается средневзвешенная частота  $\nu_{OH}$  адсорбированной воды.

Предложен метод ИК-спектроскопии для определения гидрофильности материала. Значения средневзвешенных частот валентных колебаний адсорбированной воды в спектрах поглощения веществ коррелируют с их поверхностными свойствами (гидрофильность, гигроскопичность и гидрофобность). Чем гидрофильнее материал, тем больше сдвиг полосы в сторону больших частот, тем сильнее взаимодействие поверхности с водой и слабее водородная связь между молекулами в адсорбированных слоях воды.

Сделанное предположение о связи частот валентных колебаний адсорбированной воды, гидрофильности поверхности и растворимости, подтверждается исследованием состояния адсорбированной воды в связи со скоростью растворения различных полиморфных структур одного и того же сложного органического соединения – лекарственной субстанции соли периндоприла  $C_{19}H_{32}N_2O_5 \cdot C_4H_{11}N$ .

## ФАЗОВЫЙ И ЭЛЕМЕНТНЫЙ АНАЛИЗ ПОКРЫТИЙ TiB<sub>2</sub>-Mo и TiB<sub>2</sub>-Ni, СФОРМИРОВАННЫХ НА СТАЛИ ЭЛЕКТРОВЗРЫВНЫМ МЕТОДОМ ПОСЛЕ ОБРАБОТКИ ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Гончарова Е.Н. – аспирант, <sup>2</sup> Романов Д.А. - к.т.н, доцент,

<sup>1</sup>Будовских Е.А. - д.т.н., профессор, <sup>1</sup>Громов В.Е. - д.ф.-м.н., профессор; <sup>1</sup>Антоненко А.И. - к. ф.-м.н, доцент.

<sup>1</sup> Россия, г. Новокузнецк, ФГБОУ ВПО «Центр педагогического образования Новокузнецкого филиала-института Кемеровского государственного университета»;

<sup>2</sup> Россия, г. Новокузнецк, ФГБОУ ВПО «Сибирский государственный индустриальный университет».

*romanov\_da@physics.sibsiu.ru*

Аннотация. Впервые проведено модифицирование высокоинтенсивным электронным пучком электровзрывных композиционных покрытий систем TiB<sub>2</sub>-Mo и TiB<sub>2</sub>-Ni. Выполнены исследования фазового и элементного состава поверхностного слоя стали Hardox 450, подвергнутого электровзрывному напылению композиционного покрытия системы TiB<sub>2</sub>-Mo и последующему облучению высокоинтенсивным импульсным электронным пучком субмиллисекундной длительности воздействия. Выявлены режимы электронно-пучковой обработки, позволяющие формировать плотные, с зеркальным блеском поверхностные

---

<sup>2</sup> Исследование выполнено при финансовой поддержке Гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых - кандидатов наук МК-4166.2015.2, РФФИ в рамках научных проектов № 13-02-12009 офи\_м, 15-08-03411, госзаданий Минобрнауки №№ 2708 и 3.1496.2014/К на выполнение научно-исследовательской работы. Данная работа была выполнена с частичным использованием оборудования Центра коллективного пользования «Материаловедение» СибГИУ.

слои, обладающие субмикроструктурной структурой на основе диборида титана и никеля. Выполненные исследования показывают, что электронно-пучковая обработка слоя электровзрывного напыления, осуществляемая в режиме плавления, приводит к формированию структурно и концентрационно однородного поверхностного слоя.

#### Введение

Композиционные материалы систем  $TiB_2$ -Mo и  $TiB_2$ -Ni обладают высокой износостойкостью [1]. В последние годы разрабатывается метод электровзрывного напыления (ЭВН) покрытий, который позволяет получать высококачественные беспористые покрытия, обладающие адгезией с основой на уровне когезии и высокими функциональными свойствами [2]. Путем изменения параметров воздействия метод позволяет, как наносить покрытия из продуктов взрыва проводников, так и осуществлять формирование композиционных покрытий [3–5]. Перспективным направлением развития способов ЭВН композиционных материалов является модифицирование этих покрытий высокоинтенсивными электронными пучками [6].

С целью снижения степени шероховатости поверхности покрытий, гомогенизации и наноструктурирования, повышения износостойкости, твердости используется импульсно-периодическое электронно-пучковое переплавление покрытия и последующее его высокоскоростное охлаждение путем отвода тепла в объем интегрально холодного образца. Высокая энергетическая эффективность, однородность плотности энергии по сечению потока, хорошая воспроизводимость импульсов и высокая частота их следования выгодно отличают импульсные электронные пучки от импульсных потоков низкотемпературной плазмы при потенциальном использовании тех и других в технологических целях. Технология электронно-пучковой обработки (ЭПО) металлических, металлокерамических и

керамических материалов используется для кратного повышения их служебных характеристик.

Цель настоящей работы заключалась в изучении структурно-фазовых состояний электровзрывных покрытий систем  $TiB_2$ -Mo и  $TiB_2$ -Ni, модифицированных высокоинтенсивным электронным пучком в различных режимах.

Материал и методика исследования

ЭВН покрытий проводили на модернизированной электровзрывной установке ЭВУ 60/10М [7]. Она включает емкостный накопитель энергии и импульсный плазменный ускоритель, состоящий из коаксиально-торцевой системы электродов с размещенным на них проводником, разрядной камеры, локализирующей продукты взрыва и переходящей в сопло, по которому они истекают в вакуумную технологическую камеру с остаточным давлением 100 Па. Электровзрыв происходит в результате пропускания через проводник тока большой плотности при разряде накопителя.

Покрyтия наносили на образцы стали Hardox 450 ( $C = 0,18$ ;  $S = 0,70$ ;  $Mn = 1,6$ ;  $Mo = 0,25$ ;  $P \leq 0,01$ ;  $S \leq 0,01$  вес. %) площадью  $1,5 \text{ см}^2$ . Режим термосилового воздействия на облучаемую поверхность задается выбором зарядного напряжения емкостного накопителя энергии установки, по которому рассчитывается поглощаемая плотность мощности [7]. ЭВН проводили с использованием композиционного электрически взрываемого проводника [8] для нанесения покрытий, представляющий собой двуслойную либо никелевую либо молибденовую фольгу с заключенной в них навеской порошка диборида титана. Поглощаемая плотность мощности при напылении составляла  $4,5 \text{ ГВт/м}^2$ . Для ЭВН покрытий системы  $TiB_2$ -Ni использовали никелевое сопло, для покрытий  $TiB_2$ -Mo – молибденовое. Диаметр сопла – 20 мм, расстояние образца от среза сопла – 20 мм и в том и в другом случае. Массы фольги Ni и порошковой

навески  $TiB_2$  составляли 410 и 205 мг соответственно и 530 и 530 мг соответственно Mo фольги и  $TiB_2$ .

Модифицирование поверхности электровзрывных покрытий осуществляли высокоинтенсивным электронным пучком, позволяющим переплавлять поверхностный слой с последующим высокоскоростным охлаждением за счет отвода тепла в объем материала. Использовали установку «СОЛЮ» института сильноточной электроники Сибирского отделения РАН [7]. Режимы электронно-пучковой обработки (ЭПО) представлены в таблице 1.

Таблица 1. Режимы электронно-пучковой обработки

Режим	Параметры ЭПО		
	$E_s$ , Дж/см <sup>2</sup>	$t$ , мкс	$N$ , имп.
1	45	100	10
2	50	100	10
3	55	100	10
4	60	100	10
5	60	200	20

Примечание.  $E_s$ , – плотность энергии пучка электронов,  $t$  – длительность импульса,  $N$  – число импульсов.

Сканирующую электронную микроскопию осуществляли с использованием растрового электронного микроскопа Carl Zeiss EVO50, оснащенного приставкой для рентгеноспектрального анализа.

Перед микроскопическими исследованиями шлифы подвергали химическому травлению раствором следующего состава:  $FeCl_3$  – 3 г,  $HCl$  – 2,5 мл,  $C_2H_5OH$  – 100 мл.

Исследование элементного состава покрытий осуществляли методами микрорентгеноспектрального анализа (растровый электронный микроскоп «LEO EVO 50»), фазовый состав покрытий анализировали методом электронной дифракционной микроскопии (прибор ЭМ-125). В качестве объекта исследования

использовали экстрактные угольные реплики, полученные с травленной поверхности излома покрытия.

Результаты исследования и их обсуждение

#### *Система TiB<sub>2</sub>-Mo.*

На рис. 1 представлено электронно-микроскопическое изображение структуры поверхности излома стали с покрытием состава TiB<sub>2</sub>-Mo. При анализе излома выявляются три слоя: поверхностный слой, являющийся собственно покрытием (рис. 1 а, слой 1), переходный слой, являющийся зоной термического влияния (рис. 1 а, слой 2), плавно переходящий в основной объем стали (рис. 1 а, слой 3). Граница раздела покрытие/переходный слой является существенно извилистой (рис. 1). Трещины вдоль границы раздела покрытие/переходный слой практически не наблюдаются. В совокупности это указывает на высокий уровень адгезии покрытия с подложкой. Излом покрытия выявляет его слоистое строение (рис. 1 б-г). Слои расположены параллельно поверхности покрытия, толщина слоев колеблется в пределах от 5 мкм до 10 мкм.

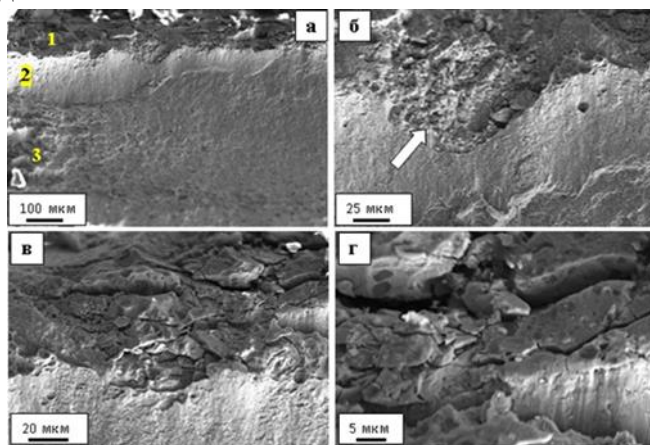


Рисунок 1. Электронно-микроскопическое изображение поверхности излома покрытия TiB<sub>2</sub>-Mo, сформированного на стали электровзрывным методом. Сканирующая электронная микроскопия.

Излом покрытия приводит к формированию трещин, разделяющих слои. Последнее означает, что покрытие находится в упруго напряженном состоянии. Структура покрытия неоднородна. Наряду с крупнокристаллическими, выявляются области, размеры кристаллитов которых не превышают 1 мкм (рис. 1 б, область указана стрелкой).

Микрорентгеноспектральный анализ поверхностного слоя материала позволил выявить элементный состав покрытия и проследить за его изменением в зависимости от расстояния до поверхности покрытия. На рис. 2 а представлено электронно-микроскопическое изображение участка поверхности излома стали с покрытием, на котором был выполнен элементный анализ материала (области элементного анализа выделены рамками). Характерное изображение энергетических спектров анализируемого материала представлено на рис. 2б.

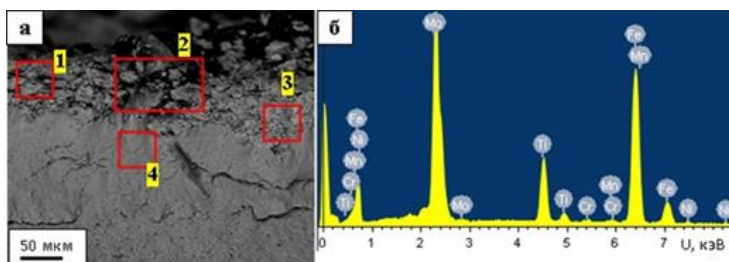


Рисунок 2. Электронно-микроскопическое изображение участка поверхности излома покрытия  $TiB_2$ -Mo, сформированного на стали электровзрывным методом; рамками выделены области микрорентгеноспектрального анализа материала. Сканирующая электронная микроскопия.

Результаты количественного микрорентгеноспектрального анализа участка стали, представленного на рис. 2 а, приведены в таблице 2.

Таблица 2.

Результаты количественного микрорентгеноспектрального анализа элементного состава участка стали, представленного на рис. 2 а.

№ спектра	Элемент, вес. %							
	Ti	Mo	Fe	Ni	Mn	Cr	C	O
1	24	44	32	0	0	0	0	0
2	10	19	22,5	0	0,5	0	41	7
3	10	42	46	0,7	0,5	0,5	0	0
4	0	0	95,4	0,5	1,3	0,7	2,1	0

Анализируя эти результаты, можно обнаружить, что формирование покрытия электровзрывным методом приводит, во-первых, к сплавлению его с подложкой. На это указывает присутствие в покрытии атомов железа, никеля, марганца и хрома. Во-вторых, формирование покрытия в условиях технического вакуума сопровождается насыщением его атомами углерода и кислорода. В-третьих, вплавление покрытия в подложку не приводит к легированию слоя термического влияния подложки элементами покрытия. В-четвертых, с увеличением расстояния от поверхности покрытия увеличивается концентрация атомов железа и снижается концентрация атомов титана; концентрация атомов молибдена по толщине покрытия изменяется незначительно. В-пятых, присутствующий в элементном составе напыляемого покрытия бор методами микрорентгеноспектрального энергодисперсионного анализа в исследуемом материале не обнаружен.

В результате индирования микроэлектронограмм, полученных с экстрагированных частиц, были обнаружены следующие фазы: бориды железа ( $\text{FeB}$ ,  $\text{Fe}_3\text{B}$ ,  $\text{Fe}_4\text{B}_2$ ), борид молибдена  $\text{MoB}_4$ , бориды титана  $\text{TiB}_2$  и  $\text{Ti}_2\text{B}_5$ , карбиды железа  $\text{Fe}_3\text{C}$  и молибдена  $\text{MoC}$ , карбоборид молибдена  $\text{Mo}_2\text{BC}$ .



Характерные изображения некоторых из выявленных фаз приведены на рис. 3.

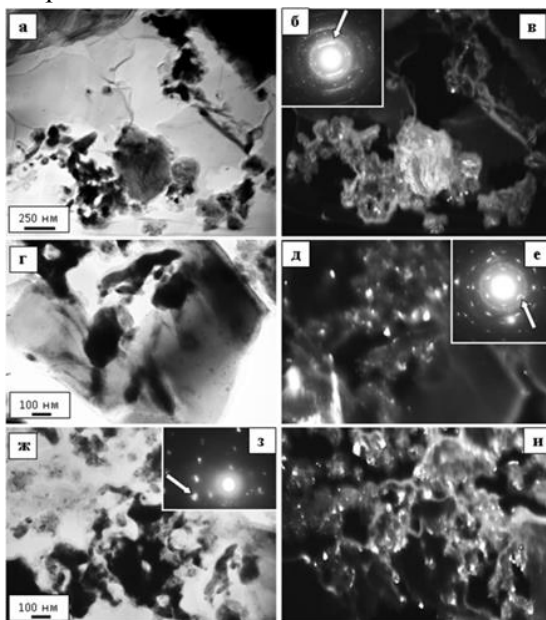


Рисунок 3. Электронно-микроскопическое изображение частиц вторых фаз, экстрагированных из покрытия, сформированного на стали электровзрывным методом; (а-в)  $Ti_2B_5$ , (г-е)  $MoV_4$ , (ж-и)  $Mo_2VC$ ; а, г, ж – светлопольные изображения; б, е, з – микроэлектроннограммы; в, д, и – темнопольные изображения, полученные в рефлексах  $[101]Ti_2B_5$ ,  $[110]MoV_4$ ,  $[241]Mo_2VC$ , соответственно.

Анализируя результаты, представленные на рис. 3, можно отметить, что экстрагированные частицы второй фазы имеют размеры, изменяющиеся в пределах (20...60) нм, т.е. относятся к нанокристаллическим образованиям. В большинстве случаев экстрагированные частицы имеют сферическую, реже, глобулярную, форму. Частицы, преимущественно, располагаются островками, что свидетельствует о неоднородном распределении легирующих элементов и может указывать на вариацию физико-механических свойств покрытия, как в плоскости напыления, так

и по толщине. К аналогичным выводам приходим после анализа рис. 6.

#### *Система TiB<sub>2</sub>-Ni.*

На рис. 4 представлено электронно-микроскопическое изображение структуры поверхности излома стали с покрытием состава TiB<sub>2</sub>-Ni.

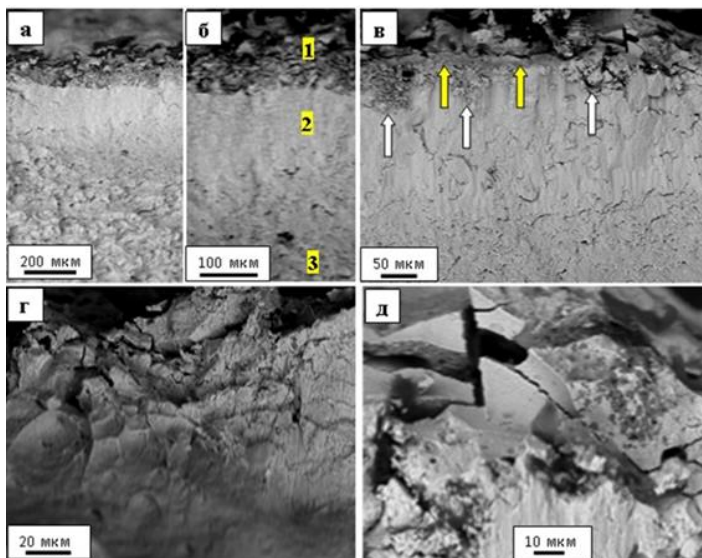


Рисунок 4. Электронно-микроскопическое изображение поверхности излома покрытия Ti-B-Ni, сформированного на стали электровзрывным методом. На (б) цифрами обозначено: 1 – собственно покрытие, 2 – зона термического влияния, 3 – основной объем подложки; на (в): светлыми стрелками указаны участки проплавления, цветными стрелками – переходный слой, разделяющий покрытие и подложку. Сканирующая электронная микроскопия.

При анализе излома, как и в случае системы TiB<sub>2</sub>-Mo, выявляются четыре слоя: поверхностный слой, являющийся собственно покрытием (рис. 4 б, слой 1), тонкий переходный слой (рис. 4 в, слой указан стрелками), зона термического влияния (рис. 4 б, слой 2), плавно переходящая в основной объем

стали (рис. 4 б, слой 3). Между переходным слоем и собственно покрытием наблюдаются микротрещины, расположенные параллельно поверхности покрытия и образовавшиеся в процессе формирования излома (рис. 4 в).

ЭВН сопровождается проплавлением подложки (рис. 4 в, участки проплавления указаны светлыми стрелками). Глубина проплавления сопоставима или больше толщины напыляемого покрытия. Покрытие на изломе фрагментировано, т.е. разбито на отдельные участки размерами (10...20) мкм (рис. 4 г). При формировании излома наблюдается растрескивание покрытия преимущественно по границам фрагментов (рис. 4 г, д). Анализ строения излома позволяет сделать заключение о микрокристаллическом строении покрытия (рис. 4 в, д) – размеры фасеток скола составляют единицы микрометров.

Микрорентгеноспектральный анализ поверхностного слоя материала позволил выявить элементный состав покрытия и проследить за его изменением в зависимости от расстояния до поверхности покрытия. На рис. 5 а представлено электронно-микроскопическое изображение участка поверхности излома стали с покрытием, на котором был выполнен элементный анализ материала (области элементного анализа выделены рамками).

Характерное изображение энергетических спектров анализируемого материала представлено на рис. 5 б. Результаты количественного микрорентгеноспектрального анализа участка стали, представленного на рис. 5 а, приведены в таблице 3.

Анализируя результаты, представленные на рис. 5 и в таблице 3, можно обнаружить, что формирование покрытия электровзрывным методом приводит, во-первых, к сплавлению его с подложкой. На это указывает присутствие в покрытии атомов железа, и марганца. Во-вторых, формирование покрытия в условиях технического вакуума сопровождается насыщением его атомами углерода и кислорода.

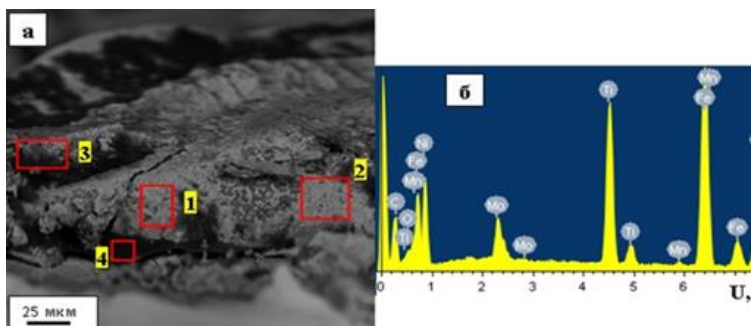


Рисунок 5. Электронно-микроскопическое изображение участка поверхности излома покрытия Ti-B-Ni, сформированного на стали электровзрывным методом; рамками выделены области микрорентгеноспектрального анализа материала. Сканирующая электронная микроскопия.

Таблица 3. Результаты количественного микрорентгеноспектрального анализа элементного состава участка стали, представленного на рис. 5 а.

№ спектра	Элемент, вес. %							
	Ti	Ni	Fe	Mo	Mn	C	O	Ti
1	13	28	30,5	5	0,5	19	4	13
2	16	31	33	6	0,5	13,5	0	16
3	8	20	14	2	0	48	8	8
4	1	1	1	1	0	71	25	1

В-третьих, с увеличением расстояния от поверхности покрытия увеличивается концентрация атомов железа; концентрация атомов титана и никеля практически не зависит от расстояния до подложки. В-четвертых, в покрытии выявлено присутствие атомов молибдена, что позволяет говорить о более сложном элементном составе напыляемого слоя. В-пятых, присутствующий в элементном составе напыляемого покрытия бор методами микрорентгеноспектрального энергодисперсионного анализа в исследуемом материале не

обнаружен. В результате индирования микроэлектроннограмм, полученных с экстрагированных частиц, были обнаружены следующие фазы: бориды железа состава  $\text{Fe}_3\text{B}$ , бориды никеля ( $\text{Ni}_3\text{B}$ ), бориды титана ( $\text{Ti}_2\text{B}_5$ ), карбид железа ( $\text{Fe}_3\text{C}$ ). Характерные изображения некоторых из выявленных фаз приведены на рис. 6.

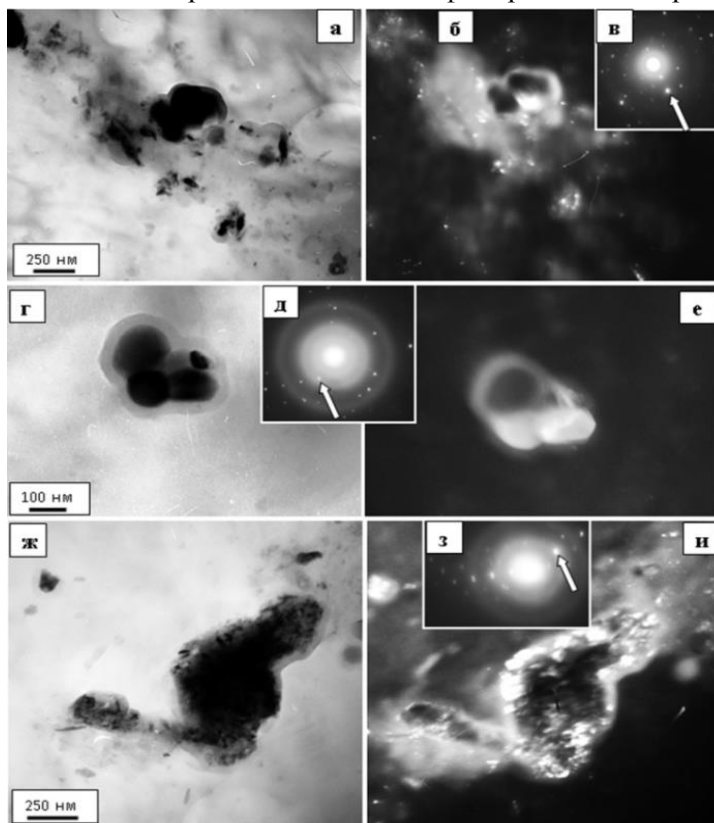


Рисунок 6. Электронно-микроскопическое изображение частиц вторых фаз, экстрагированных из покрытия, сформированного на стали электровзрывным методом; (а-в) -  $\text{Ni}_3\text{B}$ , (г-е) -  $\text{Ti}_2\text{B}_5$ , (ж-и) -  $\text{Fe}_3\text{B}$ ; а, г, ж – светлопольные изображения; в, д, з – микроэлектроннограммы; б, е, и – темнопольные изображения, полученные в рефлексах  $[112]\text{Ni}_3\text{B}$ ,  $[101]\text{Ti}_2\text{B}_5$ ,  $[200]\text{Fe}_3\text{B}$ , соответственно.

## Выводы

Системы  $\text{TiB}_2\text{-Mo}$  и  $\text{TiB}_2\text{-Ni}$  осуществлена электронная микроскопия поверхности излома покрытия, сформированного на стали электровзрывным методом, и выявлено их многослойное строение. Слои толщиной от 5 мкм до 10 мкм расположены параллельно поверхности покрытия и на изломе разделены микротрещинами. ЭВН приводит к взаимному легированию покрытия и подложки, что указывает на сплавление покрытия с металлом подложки. Для покрытия системы  $\text{TiB}_2\text{-Mo}$  выявлено присутствие в нем боридов, карбидов и карбоборидом железа, титана и молибдена. Показано, что частицы второй фазы имеют преимущественно сферическую или глобулярную форму и относятся к нанокристаллическим образованиям.

### Список используемой литературы

1. Zhang J., Fu Z., Wang W., Wang H. Microstructure and mechanical Properties of  $\text{TiB}_2/(\text{Ni}+\text{Mo})$  composites fabricated by hot pressing // J. Mater. Sci. Technol. – 2000. – Vol. 16. – No. 6. – P. 634–636.
2. Budovskikh E.A., Gromov V.E., Romanov D.A. The Formation Mechanism Providing High-Adhesion Properties of an Electric-Explosive Coating on a Metal Basis // Doklady Physics – 2013. – Vol. 58. No. –3. – P. 82–84.
3. Romanov D.A., Budovskikh E.A., Gromov V.E. Surface Relief and Structure of Electroexplosive Composite Surface Layers of the Molybdenum-Copper System // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques – 2011. – Vol. 5. – No. 6. – P. 1112–1117.
4. Romanov D.A., Budovskikh E.A., Zhmakin Yu. D., Gromov V.E. Surface modification by the EVU 60/10 electroexplosive system // Steel in translation. – 2011. – Vol. 41. – No. 6. – P. 464–468.
5. Vashchuk E.S, Romanov D.A., Budovskikh E.A., Ivanov Yu.F. Electroexplosive boron-copper plating and subsequent electron-

beam treatment of steel 45 // Steel in translation. – 2011. – Vol. 41. – No. 6. – P. 469–474.

6. Ivanov Yu., Teresov A., Ivanova O. et al. Formation of Surface Layers in Cu-C System // Advanced Materials Research.– 2014. –Vol. 1013. – P. 224–228.

7. Романов Д. А., Будовских Е. А., Громов В. Е., Иванов Ю. Ф. Электровзрывное напыление износостойких и электроэрозионностойких покрытий. – Новокузнецк: Изд-во ООО «Полиграфист», 2014. – 203 с.

8. Патент РФ № 2478732 на изобретение «Композиционный электрически взрываемый проводник для электровзрывного напыления покрытий или электровзрывного легирования поверхности металлов и сплавов» / Романов Д.А., Будовских Е.А., Громов В.Е.; заявл. 13.09.2011; опубл. 10.04.2013, Бюл. № 10. 8 с.

## **СВОЙСТВА И КИНЕТИКА ДИСЛОКАЦИЙ СОМИЛИАНЫ ПРИ ДЕФОРМАЦИИ АМОРФНЫХ МАТЕРИАЛОВ**

**Емалетдинов А.К.**

*Россия, г. Уфа, Уфимский государственный авиационный  
технический университет  
emaletd@mail.ru*

Аморфные материалы обладают особыми механическими свойствами. Для описания линейных дефектов аморфной структуры предложена модифицированная модель Френкеля - Конторовой. Анализ решений динамического уравнения показал, что в таких материалах возможны дислокации Сомилианы. Вектор Бюргерса и ширина ядра такой дислокации Сомилианы случайно осциллируют. Принципиально новое поведение вычисленного тензора напряжений дислокации Сомилианы, в отличие от решеточной дислокации, заключается в

экспоненциальном спадании напряжений сразу от ядра и наличии свободного объема поля деформаций. Упругая энергия дислокаций Сомилианы почти на два порядка меньше чем упругая энергия решеточных дислокаций. Вычисленные напряжения дислокаций Сомилианы аморфной структуры также являются экспоненциально затухающими, в отличие от решеточных дислокаций. Напряжения дислокаций и ансамбля дислокаций Сомилианы объясняют малый коэффициент упрочнения на кривых деформирования. Малая упругая энергия дислокаций Сомилианы объясняет маленькую экспериментальную величину запасенной латентной энергии деформации  $\sim 4\%$ . Показано, что для описания диаграммы и особенностей деформации аморфных материалов необходимо применять принципы неравновесной термодинамики и синергетики. Показано, что общий синергетический подход должен основываться на системе уравнений кинетики вакансий, дислокаций Сомилианы и микротрещин. Проведено моделирование скачкообразной кривой деформирования и других закономерностей деформации аморфных материалов, наблюдаемых в эксперименте.

## **ВЛИЯНИЕ ДИСЛОКАЦИОННОЙ СТРУКТУРЫ НА ДИФфуЗИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ В ЖАРОПРОЧНОМ СПЛАВЕ ПРИ ТЕРМОУСТАЛОСТИ**

**Емалетдинов А.К., Галактионова А.В.**

*Россия, г. Уфа, Уфимский государственный авиационный  
технический университет  
emaletd@mail.ru*

Долговечность никелевых жаропрочных сплавов при эксплуатации авиационных двигателей определяется эволюцией структуры, зарождением пор и трещин под действием



циклической термомеханической нагрузки. Избыточная концентрация вакансий определяется рабочей температурой, напряженным состоянием сплава, состоянием границ зерен и др. Благодаря размерному несоответствию возникают внутренние напряжения и сетка дислокаций несоответствия. Записано термодинамическое условие гетерогенного зарождения поры с использованием свободной энергии системы, включающей вклад поверхностного натяжения свободной поверхности и межфазной границы, упругой энергии сетки дислокаций несоответствия, действия внутренних и внешних термоупругих напряжений, концентрации неравновесных вакансий, включений в границах, возникновения диффузионных потоков химических компонентов сплава. Выполнена термодинамическая оценка условий образования поры критического размера. Проведен анализ критического размера пор с учетом влияния межфазной границы, сетки дислокаций несоответствия, концентрации напряжений в никеле, температурных напряжений и др. Показано, что критический размер поры существенно уменьшается при учете перечисленных выше энергетических воздействий. Выполнены численные расчеты критического размера поры при действии различных факторов. Рассмотрено влияние зернограницной диффузии и поглощения дислокационной сетки на скорость роста поры, проведены численные расчеты.

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВИБРАЦИОННОЙ НАГРУЗКИ НА КИНЕТИКУ ПОР**

**Емалетдинов А.К., Галактионова А.В.**

*Россия, г. Уфа, Уфимский государственный авиационный  
технический университет  
emaletd@mail.ru*

Динамика роста пор при вибрационном нагружении изменяется благодаря создаваемой концентрации избыточных вакансий. Критический размер зародыша поры существенно зависит от пересыщенности вакансиями. Рассмотрен рост одиночной поры под действием циклических напряжений растяжения. Проведено описание концентрации вакансий с помощью химического потенциала вакансий. Записано уравнение, описывающее кинетику для концентрации вакансий вблизи поры в приближении времени жизни вакансии до ее поглощения стоком (порой). К уравнению необходимо добавить соответствующие граничные условия на бесконечности и границе поры для потока вакансий. В стационарном режиме роста записано распределение концентрации вакансий в окрестности поры и выражение потока вакансий на пору. Скорость роста поры будет определяться уравнением сохранения потока вакансий и вероятностью поглощения вакансий. Распределение концентрации точечных дефектов зависит амплитуды и частоты напряжений. Избыточная концентрация точечных дефектов возрастает при увеличении амплитуды напряжения по экспоненциальному закону. Начиная с определенного уровня напряжений стационарная избыточная концентрация точечных дефектов достигает насыщения. Сделаны оценки критического размера поры в зависимости от величины пересыщения. Сделаны оценки влияния вибрационных напряжений на коэффициент вакансионной диффузии и вероятность поглощения вакансий. Проведено численное моделирование задачи и получены графики для скорости роста поры для различных режимов нагружения с учетом перечисленных факторов изменения динамики роста поры.

## **ПРИМЕНЕНИЕ ПРИНЦИПОВ СИНЕРГЕТИКИ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ПРОЦЕССОВ ПЛАЗМЕННОГО НАПЫЛЕНИЯ**

**Емалетдинов А.К.**

*Россия, г. Уфа, Уфимский государственный авиационный  
технический университет  
emaletd@mail.ru*

Показано, что для оптимизации кинетических процессов технологий нанесения покрытий, прогнозирования механических свойств и разрушения материалов с покрытиями необходимо применять принципы неравновесной термодинамики и синергетики. С позиций неравновесной термодинамики и синергетики кинетика самоорганизации структуры материала покрытия и основы при изменении температурно-напряженных воздействий связаны со сменой микромеханизмов деформации и фазовыми превращениями. В процессе нанесения покрытия под действием термоэмиссионных воздействий происходит самоорганизация дефектной субструктуры основы, которая определяет физико-химические свойства основы. С позиций неравновесной термодинамики и синергетики, образующиеся дислокационные субструктуры, являются диссипативными структурами, а их образование связано с появлением коллективных мод движения в кинетике дислокаций. Показано, что общий синергетический подход должен основываться на системе уравнений кинетики зарождения и взаимодействия вакансий, дислокаций, дисклинаций, микротрещин и др. дефектов. Использование синергетических моделей при нанесении покрытий позволит оптимизировать технологии плазменной обработки и долговечность материалов с покрытиями при эксплуатации, создать интеллектуальные, самонастраивающиеся системы управления параметрами

технологического процесса плазменной обработки, проектировать оптимизирующие термомеханическое оборудование и др.

## **ФОРМИРОВАНИЕ СОСТАВА ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЕВ СИСТЕМЫ (Ni<sub>50</sub>Cu<sub>50</sub>)+Al ПРИ РАССФОКУСИРОВАННОМ ЛАЗЕРНОМ ОБЛУЧЕНИИ**

**Жихарев А.В., Баянкин В.Я., Климова И.Н.**

*Россия, Ижевск, ФТИ УрО РАН*

*less@ftiudm.ru*

В данной работе методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии исследовано влияние числа импульсов лазера на особенности взаимодействия неравновесной подложки (Ni<sub>50</sub>Cu<sub>50</sub> фольги) с нанесенным слоем алюминия. Лазерное воздействие на образцы осуществлялось оптоволоконным иттербиевым лазером Ldesigner.

В результате проведенных исследований установлено, что после облучения образцов происходит изменение химического состава поверхностных слоев медно-никелевых фольг. В слое подложки до 15 нм зарегистрировано появление атомов алюминия, а содержание меди и никеля снижается. Расчет температуры в зоне лазерного облучения показал, что термическое воздействие на систему (Ni<sub>50</sub>Cu<sub>50</sub>)+Al было незначительным для возникновения термодиффузионного механизма перераспределения элементов системы. Следовательно, предполагается, что процессы, приводящие к конечному состоянию химического состава подложки, могут быть следующие. В результате теплового расширения-сжатия системы во время лазерного облучения в образцах возникают волны упругого напряжения, представляющие собой подобие ударной волны, распространяющейся вглубь облучаемого

материала. На фронте распространения такой волны возможна миграция отдельных атомов алюминия из напыленного слоя вглубь медно-никелевой фольги. Массоперенос в подложку, скорее всего, мог быть реализован преимущественно по системе протяженных линейных и планарных дефектов (границам зерен и дислокациям).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект N 13-02-96002\_p\_урал\_a).

## **РАДИАЦИОННО-ИНДУЦИРОВАННЫЕ СТАЦИОНАРНЫЕ СТРУКТУРНЫЕ СОСТОЯНИЯ В ПИРОЛИТИЧЕСКОМ НИТРИДЕ БОРА**

**Е.И. Исаев, В.А. Степанов.**

*Россия, г. Обнинск, ИАТЭ НИЯУ МИФИ*

*e.isaev87@gmail.com*

Материалы из графитоподобного нитрида бора вне зависимости от способа получения являются керамиками с равновесной стабильной наноструктурой, в которых размеры зерен-кристаллитов всегда находятся в нанометровом диапазоне. Это связано с сильной анизотропией химических связей вдоль и поперек базисных гексагональных плоскостей в кристаллической структуре. В пиролитическом нитриде бора, получаемом методом газофазового осаждения [1], хорошо выражена текстура из тонких от 1 до 10 нм кристаллитов с поперечным размером 30–80 нм.

В результате облучения быстрыми нейтронами в материалах образуются каскады атом-атомных соударений, часть из которых (~3-4% [2]) представляет собой компактную область, в которой выделяется вся энергия первично-выбитого атома. Средний размер таких каскадных областей составляет 6-7 нм. Если

размеры зерен керамики сравнимы с размерами каскадов, то связанная с атомными смещениями повреждаемость материала компенсируется процессами восстановления структуры в пределах отдельных кристаллитов на стадии теплового пика каскадов, когда температура в каскадной области может превышать температуру плавления (для BN - 3000 К).

В данной работе методом рентгеноструктурного анализа исследовались образцы пиролитического нитрида бора, облученные нейтронами в интервале доз  $10^{20}$ – $5 \cdot 10^{22}$  н/см<sup>2</sup> ( $E > 0,1$  МэВ) при температуре 670 К и после серии отжигов в интервале температур 600 – 1600 К. Облучение проводилось на реакторах БР-10 (ГНЦ РФ ФЭИ, г. Обнинск) и БН-600 (Белоярская АЭС, г. Заречный).

С помощью анализа положения и формы рентгеновских линий (002) и (102) показано, что в процессе облучения быстрыми нейтронами в пиролитических материалах из нитрида бора образуются стационарные (зависящие только от температуры облучения) структуры. Радиационно-индуцированные стационарные структурные состояния возникают при превышении некоторой дозы насыщения, при которой плотные каскады полностью покрывают весь объем материала.

Полученные результаты обосновывают использование материалов из нитрида бора, в частности, в качестве мониторов температуры при высокодозном нейтронном облучении [3].

## ЛИТЕРАТУРА

1. Дедков В.С., Иванов Ю.С., Лопатин В.В., Шарупин Б.Н., Особенности строения пиролитического нитрида бора // Кристаллография.- 1993.- Т.38.- N2.- С. 217-221
2. Степанов В.А. Свечение каскадов атом-атомных соударений в кварцевых волокнах // ВАНТ Сер.

Материаловедение и новые материалы.- 2006.- Вып. 1(66).- С. 54-62

3. Степанов В.А., Исаев Е.И., Крюкова Л.М., Плаксин О.А., Степанов П.А., Чернов В.М. Диэлектрические мониторы условий высокодозного и высокотемпературного реакторного облучения // Известия ВУЗов. Ядерная энергетика, 2015, №1, С. 76-84.

**ОСОБЕННОСТИ ПОЛЗУЧЕСТИ  
НАНОСТРУКТУРИРОВАННОГО Zr И СПЛАВА Zr1Nb  
ПОЛУЧЕННЫХ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ  
ДЕФОРМАЦИЕЙ ПРОКАТКОЙ**

**Карасева Е.В., Мац А.В., Соколенко В.И., Савчук Е.С.,  
Фролов В.А., Шульгин Н.А.**

*Украина, г.Харьков, ННЦ ХФТИ  
jfrolova07@mail.ru*

В области температур 300-700 К изучены особенности ползучести, структура и электрофизические характеристики наноструктурированных Zr и сплава Zr1Nb (~ 60-80 нм), полученных интенсивной пластической деформацией прокаткой при 100 К.

Показано, что сформированная прокаткой наноструктура становится неустойчивой в процессе ползучести вследствие изменения условий деформирования [1]. В результате пластическое течение вначале осуществляется за счет перестройки дефектной структуры и сопровождается релаксацией напряжений, и только при напряжениях близких к пределу прочности - за счет скольжения дислокаций по границам фрагментов.

Низкотемпературные отжиги и ультразвуковая обработка наноструктурированных Zr и сплава Zr1Nb не приводят к

заметному изменению микроструктуры, однако наблюдаются признаки, свидетельствующие о начале процессов возврата. В частности изменяется характер ползучести, что свидетельствует об изменении механизмов деформации и на электронно-микроскопических снимках наблюдаются более четкие границы фрагментов. При этом прочностные характеристики исследуемых материалов снижаются на  $\sim 15-20\%$ , а пластичность увеличивается на  $\sim 40-50\%$ , и полученная структура становится более устойчивой по отношению к новой схеме упруго-напряженного состояния и температурно-скоростного режима деформирования.

1. Рыбин В.В. Большие пластические деформации и разрушение металлов, Москва: Металлургия. – 1986. – 224 с.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОЗАЩИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ  
ДЛЯ ПЕРСПЕКТИВНОГО РАДИОПРОЗРАЧНОГО  
ОБТЕКАТЕЛЯ ЛЕТАТЕЛЬНОГО АППАРАТА**

**Козик В.Г., Степанов П.А., Атрощенко И.Г., Шуткина О.В.**

*Россия, Калужская область, город Обнинск,*

*ОАО «ОНПП «Технология»*

*info@technologiya.ru*

Композиционные материалы (КМ) – многофункциональные материалы, свойства которых являются функцией свойств компонентов, входящих в их состав. Среди многочисленных типов КМ функционального (специального) назначения, радиопрозрачные, радиоэкранирующие и радиопоглощающие материалы, материалы для защиты от высокоскоростного инденторного воздействия, теплозащитные материалы, сотовые материалы позволяют существенно расширить использование



КМ в изделиях современной техники, отвечающих специфическим условиям эксплуатации.

Многослойные конструкции позволяют эффективно решать проблему весового совершенства конструкций многофункционального назначения, прежде всего силовых и теплозащитных конструкций. Чаще всего они являются 3-слойными (для решения специальных задач, например, в радиопрозрачных антенных обтекателях, они могут быть 3-, 5-, 7-слойными) и состоят из оболочек, расположенных между ними заполнителей.

Условия работы многих конструкций ракетокосмической техники требуют использования теплозащитных материалов. Для теплоизоляционных материалов основными свойствами являются теплоизолирующая способность (теплопроводность) и температура применения.

В ходе работ по разработке и исследованию новых перспективных теплоизоляционных материалов в ОАО «ОНПП «Технология» была создана трехслойная конструкция на основе материала ХАФС. Обшивки выполняются из материала ХАФС, средний слой состоит из теплоизоляционного материала. Рассмотрены варианты применения материалов ВР-280, АТМ-6, ВТИ-14 и STORHEAT. В зависимости от предназначения конструкции, величина диэлектрической проницаемости среднего слоя может варьироваться в диапазоне от 1,5 до 4 (при частоте  $10^{10}$  Гц). Эксплуатация данной конструкции возможна до 1000 °С кратковременно и до 600 °С длительно. В ходе проведенных испытаний, приближенных к условиям эксплуатации изделия, удалось снизить температуру, действующую на элемент внутри конструкции, до 100 °С при температуре фронтальной поверхности порядка 1200 °С.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ И  
МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ АМОΡФНЫХ  
ФЕРРОМАГНИТНЫХ МИКРОПРОВОДОВ ПРИ  
ВОЗДЕЙСТВИИ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ**

**Козлов И.В., Усов Н.А., Гудошников С.А., Антошина И.А.**

*Россия, Обнинск, ИАТЭ НИЯУ МИФИ*

*ilya\_iate@mail.ru*

Ферромагнитные микропровода в стеклянной оболочке могут обладать высокой прочностью, пластичностью и уникальными магнитными характеристиками, благодаря особой аморфной структуре и оригинальной технологии получения. При пропускании переменного тока в широком интервале частот (0,5 МГц – 3 ГГц) в этих проводниках наблюдается эффект гигантского магнитного импеданса (ГМИ). Причиной данного явления является резкая зависимость эффективной магнитной проницаемости аморфного сплава, следовательно, активной и индуктивной составляющих магнито-импеданса, от продольного внешнего магнитного поля.

Магнитные свойства аморфных ферромагнитных микропроводов определяются магнитоstrictionными взаимодействиями и зависят от состава проводов и замороженных закалочных напряжений, которые развиваются в проводе при быстрой закалке из расплава. Следует отметить, что замороженные закалочные напряжения, возникающие при изготовлении, хотя и определяют магнитные характеристики провода, но не всегда являются оптимальными.

В связи с этим необходимы данные по релаксации закалочных напряжений для прогнозирования изменения параметров промышленных изделий, изготовленных из данных материалов. Кроме того, знание закономерностей изменения магнитных свойств при термической обработке позволяет разрабатывать

новые режимы обработки аморфных материалов, что обеспечивает в них более равновесную структуру и позволяет достичь нового комплекса технологических характеристик.

Применение отжига микропроводов в присутствии механических растягивающих и скручивающих напряжений под действием магнитного поля, позволит управлять магнитными свойствами микропроводов с тем, чтобы улучшить их магнитные характеристики, такие как поле магнитной анизотропии и эффективная константа магнитного затухания, которые и определяют чувствительность сенсоров, работающих на эффекте ГМИ.

Аморфные ферромагнитные микропровода весьма перспективны для применения их в качестве высокочувствительных сенсоров слабых магнитных полей, прецизионных датчиков напряжений и перемещений для создания новых типов композиционных материалов. Это обеспечивает актуальность выбранного направления исследований.

## **ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ И СОСТАВА ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ АМОРФНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА В УСЛОВИЯХ ИОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ**

**Колотов А.А., Баянкин В.Я.**

*Россия, Ижевск, ФТИ УрО РАН*

*less@ftiudm.ru*

Данная работа посвящена изучению структурных превращений и термодинамически связанных с ними сегрегационных процессов в таких неравновесных системах, как аморфные сплавы. В рамках работе исследуются закономерности эволюции структуры и состава поверхностных слоев аморфных

сплавов на основе железа, подвергнутых ионно-лучевой обработке.

В качестве объектов исследования используются модельные сплавы систем Fe-B и Fe-P подвергнутых облучению ионами различных типов - Ag, He, N, O, В. Показано, что в результате облучения в поверхностных слоях образуется набор метастабильных фаз, а их количество и состав зависит не только от параметров облучения – дозы и энергии ионов, но и от типа имплантируемых ионов. При этом немаловажно, что температура разогрева мишени, практически не зависит от типа ионов, и определяется плотностью тока и энергией первичных атомов. Из этого можно сделать вывод, что решающую роль в процессе диффузии и фазобразования играют микроскопические процессы развития каскадов атомно-атомных соударений. Сравниваются результаты рентгеноструктурного анализа и данные рентгеннофотоэлектронной спектроскопии. На основе анализа экспериментальных и литературных данных обсуждаются механизмы наблюдаемых эффектов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект N 13-02-96002\_p\_урал\_a).

**МОДЕЛИРОВАНИЕ АВТОКОРРЕЛЯЦИОННОЙ  
ФУНКЦИИ АТОМА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ЖИДКОСТИ С  
УЧЁТОМ ТРАНСЛЯЦИОННОЙ И ВРАЩАТЕЛЬНОЙ  
ОГРАНИЧЕННОЙ ДИФфуЗИИ**

**Лисичкин Ю.В., Сахарова Л.А.**

*ИАТЭ НИЯУ МИФИ, г. Обнинск*

*lisoferma@gmail.com, lsakharova@rambler.ru*

Построена феноменологическая модель автокорреляционной функции атома молекулярной жидкости, принимающая во

внимание трансляционные, вращательные и колебательные типы движения и возможность как неограниченной, так и ограниченной диффузии. Данная модель, в частности, необходима при анализе спектроскопических экспериментов на адсорбированных молекулярных жидкостях. Фурье-образ автокорреляционной функции, как известно, даёт функцию рассеяния, которую можно измерить, например, методом некогерентного рассеяния нейтронов.

При построении модели учитывался правильный асимптотический вид автокорреляционной функции для каждого из перечисленных видов движения атома при малых и больших временах, применялись мультипликативное приближение и разработанные ранее рядом авторов модели автокорреляционных функций для «частных» случаев (модели Ланжевена, Оскотского, Сирса и др.).

Функция рассеяния, полученная фурье-преобразованием построенной автокорреляционной функции, в общем случае в области квазиупругого рассеяния может содержать дельта-образный пик и различное число пиков лоренцевской формы, область неупругого рассеяния описывается гауссовским приближением. С учётом того, что наблюдаемая экспериментально функция рассеяния содержит дополнительное усреднение теоретической по функции разрешения спектрометра, форма измеряемого нейтронного спектра соответствующим образом изменяется.

Разработанная модель применена к анализу данных нейтронных экспериментов.

## **ФРАКТАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ФОТОИНДУЦИРОВАННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА В КРИСТАЛЛАХ $\text{LiNbO}_3$**

**Мануковская Д.В., Сидоров Н.В.,**

**Палатников М.Н.**

*Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И.В. Тананаева Кольского Научного Центра Российской Академии Наук, ИХТРЭМС КНЦ РАН, Россия, Мурманская область, г. Апатиты, Академгородок, 2ба, [deenka@yandex.ru](mailto:deenka@yandex.ru)*

В сегнетоэлектрическом монокристалле ниобата лития ( $\text{LiNbO}_3$ ) под действием лазерного излучения в освещенной области возникает фотоиндуцированное рассеяние света (ФИРС). Картина ФИРС в кристалле ниобата лития многослойна, ее вид носит явно выраженный фрактальный характер. Исследование картин ФИРС послойно с помощью фрактальной размерности дает возможность оценить энергетические и оптические процессы, которые происходят в кристаллах под воздействием лазерного излучения, а также определить механизмы возникновения и взаимодействия лазерно-индуцированных дефектов.

Анализировались картины ФИРС в стехиометрических ( $\text{Li/Nb}=1$ ) кристаллах  $\text{LiNbO}_3$ , выращенных двумя способами: по стандартной технологии с избытком  $\text{Li}_2\text{O}$  и из конгруэнтного расплава с щелочным флюсом  $\text{K}_2\text{O}$ .

Выявлено, что способ выращивания стехиометрических кристаллов определяет их структуру и, соответственно, тип проводимости. Для кристаллов, выращенных по обычной технологии характерна прыжковая электронная проводимость, для выращенных с щелочным флюсом – поляронная.

**РОСТ И ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ ВЫСОКОСОВЕРШЕННЫХ  
МОНОКРИСТАЛЛОВ ЛЕЙКОСАПФИРА  
ДЛЯ РЕНТГЕНООПТИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ**

**Прохоров И.А.<sup>1</sup>, Асадчиков В.Е.<sup>2</sup>, Рошин Б.С.<sup>2</sup>,  
Буташин А.В.<sup>2</sup>, Дерябин А.Н.<sup>2</sup>**

*<sup>1</sup>Россия, Калуга, Филиал ФГБУН Института кристаллографии  
им. А.В. Шубникова РАН*

*НИЦ "Космическое материаловедение"*

*<sup>2</sup>Россия, Москва, ФГБУН Институт кристаллографии  
им. А.В. Шубникова РАН  
igor.prokhorov@mail.ru*

Монокристаллы лейкосапфира ( $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ ), благодаря уникальным свойствам этого материала – высокой температуре плавления, исключительной твердости, химической и радиационной стойкости, прозрачности в широком диапазоне длин волн – находят широчайшее применение в различных областях науки и техники. Одним из перспективных направлений использования сапфировых кристаллов является ядерное резонансное рассеяние с применением синхротронного излучения для изучения динамики решетки (фононной спектроскопии) новых материалов, содержащих такие элементы как Eu, Sm, Sn, Te, Sb и Xe. Необходимую для фононной спектроскопии с разрешением в 1 мэВ степень монохроматизации зондирующего пучка могут обеспечить высокосоввершенные кристаллы лейкосапфира в геометрии так называемого обратного рассеяния при углах брэгговского отражения, близких к  $90^\circ$  [1]. По сравнению с кремнием, сапфир имеет существенно большее количество «обратных» отражений, что дает возможность более тщательно подбирать необходимую для исследования определенного элемента длину волны зондирующего излучения. Однако применение кристаллов лейкосапфира в качестве

рентгенооптических элементов ограничено их относительно низким структурным совершенством, по сравнению с кристаллами кремния. Для обеспечения необходимого разрешения и высокой отражательной способности нужны кристаллы толщиной не менее 3 мм, с областями площадью  $\sim 1 \text{ мм}^2$ , в объеме которых отсутствуют трехмерные (поры, включения) и протяженные (дислокации, дефекты упаковки, микротрещины) дефекты.

Для оценки степени совершенства кристаллов лейкосапфира и отбора удовлетворяющих по качеству кристаллов, нами проанализировано более 15 образцов кристаллов, выращенных методами Вернейля, Чохральского, Киропулоса и методом кристаллизации в теплообменнике (Heat-exchanger method, НЕМ). Предварительная характеристика пластин проводилась методами двухкристальной рентгеновской дифрактометрии и плосковолновой топографии на отражение в лабораторных условиях. Для получения сведений о дефектах в объеме кристалла, были проведены исследования методом топографии в «белом» пучке синхротронного излучения. Наименьшая плотность дислокаций ( $N_D \sim 10^2 \text{ см}^{-2}$ ) наблюдалась в пластине, полученной из кристалла, выращенного методом Киропулоса.

Тестирование этого кристалла методом топографии в геометрии обратного рассеяния на станции ID18 Европейского центра синхротронного излучения (ESRF) на предмет возможности его использования в качестве обратно рассеивающего монохроматора в синхротронных экспериментах по ядерному резонансному рассеянию дало обнадеживающие результаты [2], поскольку разрешение в удовлетворяющей по размеру малой ( $\sim 1 \text{ мм}^2$ ) области кристалла толщиной 3 мм составило менее 2 мэВ на энергии 24 кэВ. Дальнейшее совершенствование технологии роста кристаллов сапфира



направлено на получение кристаллов с бездислокационными областями большего размера.

### **Литература.**

1. Shvyd'ko Yu.V., X-Ray Optics, Springer Ser. Optical Science, **98** (2004).
2. Asadchikov V.E., Hermann R.P. et al, ESRF Users' Meeting, Grenoble, 3-5 February, 34 (2014).

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект №13-02-91325-СИГ\_a).*

## **МИКРООДНОРОДНОСТЬ КРИСТАЛЛОВ Ge(Ga), ВЫРАЩЕННЫХ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ВОЗМУЩЕНИЯХ ПРОЦЕССА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ**

**Прохоров И.А.<sup>1</sup>, Серебряков Ю.А.<sup>1</sup>, Сидоров В.С.<sup>1</sup>,  
Власов В.Н.<sup>1</sup>, Стрельченко С.С.<sup>2</sup>**

*<sup>1</sup>Россия, Калуга, Филиал ФГБУН Института кристаллографии  
им. А.В. Шубникова РАН*

*НИЦ "Космическое материаловедение"*

*<sup>2</sup>Россия, Калуга, КФ МГТУ им. Н.Э. Баумана  
igor.prokhorov@mail.ru*

Важность проблемы получения кристаллов с высокой однородностью свойств инициировала интенсивные исследования процессов, ответственных за формирование концентрационных и структурных неоднородностей в кристаллах. Они стали центральной частью экспериментов по росту кристаллов в условиях микрогравитации, а также по физическому моделированию условий тепломассопереноса, характерных для малой гравитации. Неоднородности кристаллов, выявляемые различными аналитическими методами, отражают особенности тепломассопереноса вблизи фронта кристаллизации

и являются основным источником информации об особенностях процесса кристаллизации и возмущающих эффектах различных внешних факторов.

В докладе обобщается опыт применения наиболее чувствительных, главным образом, рентгено топографических методов для диагностики кристаллов, выращенных в различных условиях тепломассопереноса. Исследованы особенности реальной структуры кристаллов Ge(Ga), выращенных в условиях ослабленной термогравитационной конвекции по программе наземной подготовки полетных экспериментов и на борту автоматических космических аппаратов “Фотон”. Выявлен ряд специфических особенностей в распределении легирующей примеси, определяющих неоднородность кристаллов.

Для кристалла Ge(Ga), выращенного методом бестигельной зонной плавки в условиях микрогравитации [1], характерно резко неоднородное радиальное распределение примеси, обусловленное проявлением “эффекта грани”. Образование специфических пакетов полос роста в исследованном кристалле свидетельствует о том, что кристалл рос в условиях интенсивного перемешивания расплава из-за развития нестационарной конвекции Марангони при реализованных условиях зонной перекристаллизации в невесомости.

Проведен анализ структурного отклика кристаллов Ge(Ga), выращенных в наземных условиях, на различные динамические возмущения расплава в процессе кристаллизации, моделирующие специфику проведения экспериментов на борту космических аппаратов [2]. Установлено, что изменения ориентации ростовой установки (и, соответственно, положения фронта кристаллизации) относительно вектора силы тяжести приводят к локальным нарушениям в распределении примеси в выращиваемых кристаллах, выявляемым на плосковолновых рентгеновских топограммах в виде индивидуальных полос роста.

Проведены количественные оценки амплитуды вариации состава в таких областях, основанные на анализе контраста их изображения на топограммах.

При кристаллизации в поле торсионных вибрационных возмущений наблюдается образование мелкомасштабных примесных полос роста. Эти процессы сопровождаются формированием ряда специфических особенностей реальной структуры кристаллов, связанных с образованием малоугловых границ, полос скольжения и других неоднородностей в распределении дислокаций, что, несомненно, вносит дополнительный вклад в неоднородность кристаллов.

#### **Литература.**

1. Prokhorov I.A., Zakharov B.G., Senchenkov A.S., Egorov A.V., Tison P., Camel D. // J. Cryst. Growth, **310**, 4701(2008).
2. Prokhorov I.A., Shulpina I.L., Strelov V.I., Zakharov B.G., Ratnikov V.V. // Phys. Stat. Sol. (a), **6**, 1902(2005).

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Правительства Калужской области (проект № 14-42-03034).*

## **СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ В ПОВЕРХНОСТНОМ СЛОЕ РЕЛЬСОВ ПРИ ДЛИТЕЛЬНОЙ ЭКСПЛУАТАЦИИ**

**Морозов К.В., Громов В.Е., Алсараева К.В., Перегудов О.А.,  
Коновалов С.В., Иванов Ю.Ф.**

*Сибирский государственный индустриальный университет,*

*Новокузнецк, Россия*

*gromov@physics.sibsiu.ru*

Увеличение грузонапряженности и интенсивности движения на современных магистралях приводят к раннему выходу рельсов

из строя по многим причинам, в том числе из-за контактно-усталостных повреждений. До 15% всех рельсов, снимаемых в порядке одиночной замены, имеют недопустимые нормы по износу или смятию [1]. Изнашивание рельсов является главным фактором, который обуславливает их срок службы на грузонапряженных путях.

Учитывая промышленный рост доли перевозок с одновременным повышением удельной нагрузки на поверхность катания и средней скорости движения, установление природы и закономерностей формирования структурно-фазовых состояний и дефектной субструктуры в поверхностных слоях головки рельсов, является актуальной проблемой [2].

Цель настоящей работы – анализ деформационного преобразования структуры рельсов, обусловленного длительной эксплуатацией на железной дороге (пропущенный тоннаж 1000 млн. брутто тонн).

Распределение микротвердости металла рельсов после наработки 1000 млн. тонн брутто по сечению головки в поперечном направлении от поверхности катания представлено на рис. 1.

Анализируя результаты, представленные на рис. 1, можно отметить двукратное снижение твердости в приповерхностном слое толщиной  $\approx 2$  мм по отношению к слою стали, расположенному на расстоянии  $\approx 10$  мм. Последнее указывает на деградацию структуры материала при эксплуатации.

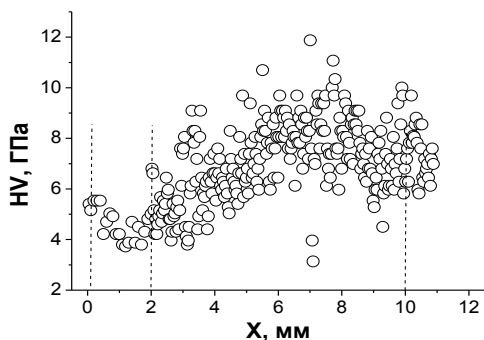


Рис. 1. Зависимость микротвердости HV от расстояния X от поверхности катания рельса. Вертикальными линиями указаны места расположения пластинок, использованных для исследования структуры методом просвечивающей электронной микроскопии тонких фольг (ПЭМ).

Микроструктура стали после травления шлифов представляет сорбит закалки с обрывками ферритной сетки. По месту интенсивной пластической деформации с поверхности выявлены белые участки наклепанного металла толщиной не более 30 мкм. По мере удаления от поверхности дисперсность перлита незначительно уменьшается, а доля ферритной составляющей снижается. Величина действительного зерна стали не зависит от расстояния до поверхности катания и оценивается в соответствии с ГОСТ 5639-82 преимущественно 9-10 баллом.

Структуру поверхности разрушения стали анализировали на образцах рельсовой стали, разрушенных при ударном нагружении. Образцы для ударных испытаний были вырезаны из средней части головки рельсов таким образом, что верхняя плоскость образца (плоскость над концентратором напряжения) являлась поверхностью катания. На полученных таким образом изломах отчетливо выявляется поверхностный слой толщиной

(200...300) мкм, который разбивается на два подслоя: поверхностный подслоя, имеющий толщину до 20 мкм, и переходный подслоя.

Поверхностный подслоя характеризуется наличием большого количества микротрещин, микропор и выбоин (рис. 2). Размеры микропор изменяются в пределах (1...2) мкм. Судя по рельефу излома, поверхностный подслоя при ударном разрушении стали в свою очередь расслаивается на некоторое количество подслоев (рис. 2, а).

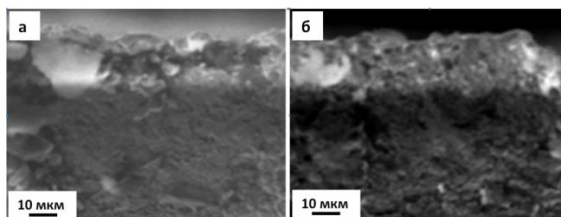


Рис. 2. Структура поверхностного подслоя, выявленного на изломе образца стали, вырезанной из зоны катания рельса после эксплуатации.

Сканирующая электронная микроскопия.

Структура переходного слоя весьма неоднородна. На сколе выявляются фасетки излома, размеры которых могут достигать до 10 мкм (рис. 3, а). Наряду с этим выявляются области, фасетки излома которых изменяются в пределах от 0,2 мкм до 1 мкм (рис. 3, б).

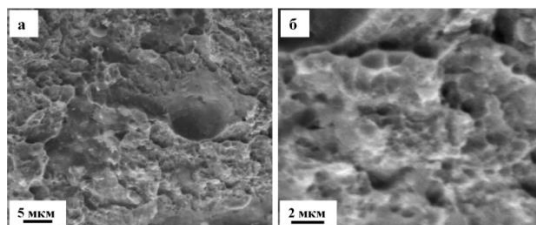


Рис. 3. Структура переходного подслоя, выявленного на изломе образца стали, вырезанной из зоны катания рельса после эксплуатации.

Сканирующая электронная микроскопия.

Следует отметить, что пограничный слой, отделяющий поверхностный слой от основного объема образца, в отдельных случаях содержит трещины, расположенные параллельно поверхности катания. Формирование излома приводит к отслаиванию поверхностного слоя от основного объема образца.

Таким образом, анализ поверхности ударного излома образцов стали, вырезанных параллельно поверхности катания, выявил формирование в процессе эксплуатации рельса поверхностного слоя, характеризующегося высоким уровнем дефектности. Эти результаты хорошо согласуются с данными, полученными при определении градиента микротвердости материала. Было отмечено, что микротвердость поверхностного слоя значительно ниже микротвердости объема материала рельса.

Методами ПЭМ установлено, что структура рельсов перед эксплуатацией, как и в [2], представлена зернами перлита пластинчатой морфологии, зернами феррита, в объеме которых наблюдаются частицы цементита разнообразной формы (зерна феррито-карбидной смеси) и зернами структурно свободного феррита, не содержащими в объеме частиц карбидной фазы. Основной структурной составляющей стали являются зерна пластинчатого перлита.

После эксплуатации структура стали существенным образом изменяется в слое, примыкающем к поверхности катания. Во-первых, выявляется фрагментация пластин цементита перлитных колоний. Во-вторых, пластины цементита разрезаются на отдельные разориентированные частицы, на что указывает квазикольцевое расположение рефлексов цементита на микроэлектроннограммах, полученных с таких пластин (рис. 4, а-в). Размеры частиц изменяются в пределах (30...40) нм. В-третьих, выявляются частицы цементита в объеме зерен феррита и в объеме ферритных пластин перлитных колоний (рис. 4, г-е).

Структура слоя рельсовой стали, расположенного на расстоянии 2 мм и 10 мм от поверхности катания после эксплуатации подобна структуре объема материала и структуре стали перед эксплуатацией. Отличительной особенностью материала слоя, расположенного на расстоянии 2 мм от поверхности катания является большое количество изгибных экстинкционных контуров, что свидетельствует о наличие внутренних полей напряжений в данном слое стали. Определены их количественные значения и показано, что источниками полей напряжений максимальной амплитуды являются границы раздела частица/матрица.

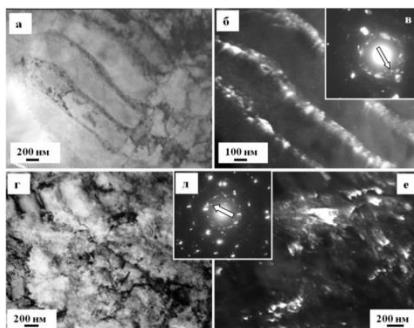


Рис. 4. ПЭМ изображение структуры слоя рельсовой стали, примыкающего к поверхности катания; а, г – светлое поле; б, е – темное поле, полученное в рефлексе  $[031]\text{Fe}_3\text{C}$  (б) и  $[211]\text{Fe}_3\text{C}$  (е); в, д – микроэлектроннограммы, стрелками указаны рефлексы, в которых получены темные поля.

*Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых - докторов наук (проект МД-2920.2015.8) и государственного задания № 3.1496.2014/К.*

#### Литература

1. Шур Е.А. Повреждение рельсов. М.: Интекст. 2012. 192 с.



2. Громов В.Е., Юрьев А.Б., Морозов К.В., Иванов Ю.Ф. Микроструктура закаленных рельсов. Новокузнецк: Изд-во «Интер-Кузбасс», 2014. 213 с.

**ТЕРМОКАПИЛЛЯРНАЯ МОДЕЛЬ ОБРАЗОВАНИЯ  
НАНОСТРУКТУР НА ПОВЕРХНОСТИ МЕТАЛЛОВ  
ОБРАБОТАННЫХ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИМ  
ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ**

**Сарычев В.Д., Невский С.А., Коновалов С.В., Алсараева К.В.,  
Громов В.Е.**

*Россия, г. Новокузнецк, Сибирский государственный  
индустриальный университет  
nevskiy\_sa@physics.sibsiiu.ru*

Известно, что воздействие электронных пучков на материал существенно изменяет его механические свойства. В частности облучение электронным пучком с плотностью энергии от 10 до 40 Дж/см<sup>2</sup> приводит к повышению усталостной долговечности сталей в 2 – 5 раз по сравнению с необлученными образцами. Одной из причин такого увеличения является формирование в поверхностных слоях наноструктуры, способствующей упрочнению поверхности. Механизм образования таких структур еще до конца не ясен. В настоящее время существует множество моделей образования поверхностных структур, большинство из которых базируются на гидродинамическом подходе. Его суть заключается в том, что при течении расплава, на его границе с твердым телом возникает термокапиллярная неустойчивость, которая приводит к образованию поверхностных периодических структур. Эта неустойчивость изучена применительно к микродиапазону длин волн. Однако в нанодиапазоне она практически не исследовалась. Поэтому целью нашей работы

является получение и анализ дисперсионного уравнения в наноразмерном диапазоне длин волн.

Для решения поставленной задачи будем рассматривать вязкую несжимаемую теплопроводную жидкость, которая занимает слой толщины  $h$  на свободной поверхности  $z = \eta(x, y, t)$ , и поглощает тепло. Как известно после воздействия электронного пучка в жидком слое устанавливается температурный профиль  $T = T_0(z)$ . Эта температура называется невозмущенной. Пусть волновой вектор возмущений направлен в плоскости  $XOY$ . Тогда возмущения температуры и скорости расплавленного слоя зависят от координат  $x, y$  и времени по закону  $\exp(i\omega t - i(mx + ly))$ . Рассмотрим коротковолновых возмущения. Поведение таких волн определяется ходом температуры в поверхностных слоях, где  $|z| \leq \kappa^{-1}$ ,  $\kappa^{-1}$  – глубина затухания волн. В этом случае градиент невозмущенной температуры вдоль оси  $z$  (по глубине слоя) будем считать постоянным. С учетом этого приближения уравнения Навье-Стокса будут иметь вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= -\frac{\partial p}{\rho \partial x} + \nu \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right), \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= -\frac{\partial p}{\rho \partial y} + \nu \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right), \\ \frac{\partial w}{\partial t} &= -\frac{\partial p}{\rho \partial z} + \nu \left( \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right), \end{aligned} \quad (1)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0,$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + w \frac{dT_0}{dz} = \chi \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right).$$

Граничные условия на поверхности расплава  $z = 0$  имеют вид:

$$\begin{aligned}
 -p + 2\nu\rho \frac{\partial w}{\partial y} &= \sigma \left( \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \eta}{\partial y^2} \right), \\
 \rho\nu \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) &= \frac{\partial \sigma}{\partial x}, \quad \rho\nu \left( \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) = \frac{\partial \sigma}{\partial y} \quad (2) \\
 \frac{\partial T}{\partial z} &= 0, \quad \frac{\partial \eta}{\partial t} = w,
 \end{aligned}$$

Условия прилипания и отсутствия температурных возмущений на границе «расплав-твердое тело»  $z = -h$  будут иметь вид:

$$u = v = w = 0, \quad T = 0. \quad (3)$$

Здесь  $u, y, w$  компоненты возмущенной скорости течения вдоль поверхности (вдоль осей  $x$  и  $y$ ) и перпендикулярно ей;  $\rho, \nu, \chi, \sigma(T)$  – плотность, кинематическая вязкость, температуропроводность и коэффициент поверхностного натяжения расплава;  $p$  – давление в слое жидкости;  $T$  – возмущение температуры  $T_0(z)$ . Возмущения величин, которые входят в (1) и (2) имеют вид:

$$\begin{aligned}
 u(x, y, z, t) &= U(z) \exp(\omega t - i(mx + ly)), \\
 v(x, y, z, t) &= V(z) \exp(\omega t - i(mx + ly)), \\
 w(x, y, z, t) &= W(z) \exp(\omega t - i(mx + ly)), \\
 T(x, y, z, t) &= T(z) \exp(\omega t - i(mx + ly)), \\
 \eta(x, y, t) &= \eta_0 \exp(\omega t - i(mx + ly))
 \end{aligned} \quad (4)$$

Решение системы (1) – (3) с учетом (4) в приближении полубесконечного слоя приводит к следующему дисперсионному уравнению:

$$\begin{aligned}
 \omega^2 \left( (\omega + 2\nu k^2)^2 - 4k_1 k^2 \nu^2 + \omega_c^2 \right) - \\
 - \omega_T^2 \left( (1 + \delta(1 - k_1/k_2))(\omega^2 + 2k^2 \nu \omega + \omega_c^2) - k/k_2 (2kk_1 \nu \omega + \omega_c^2) \right) = 0
 \end{aligned} \quad (5)$$

где  $\omega_c^2 = k^3 \sigma_0 / \rho$ ,  $\omega_T^2 = k^2 \sigma_T G_0 / \rho$ ,  $\omega_v^2 = v^2 k^2$ ,  $k_1^2 = \frac{\omega}{v} + k^2$ ,

$k_2^2 = \frac{\omega}{\chi} + k^2$ ,  $G_0 = \frac{dT_0}{dz}$ . Уравнение (5) сводится к

алгебраическому уравнению 16-й степени, зависящему от числа Прандтля и двух квадратов отношений частот  $a^2$ ,  $b^2$  ( $a = \omega_c / \omega_v$ ,  $b = \omega_T / \omega_v$ ). Для численных расчетов выбираем следующие масштабы  $k_0 \approx 10^7 \text{ м}^{-1}$ ,  $h \approx 10^{-5} \text{ м}$ ,  $G_0 \approx (T_b - T_m) / h \approx 10^8 \text{ К/м}$ ,  $T_b$ ,  $T_m$  — температуры плавления и кипения. Зависимость декремента неустойчивости от безразмерного волнового числа для алюминия представлена на рисунке 1.

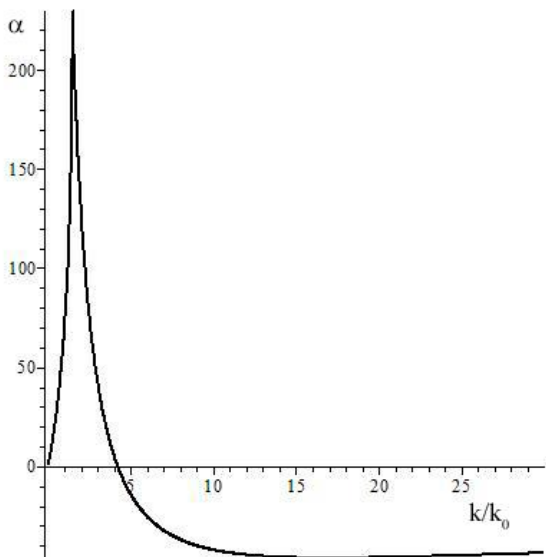


Рисунок 1 – Зависимость декремента от безразмерного волнового числа

Из анализа представленного рисунка видно, что критическое значение безразмерного волнового числа для алюминия

составляет  $k = 1,47$ . Это соответствует критической длине волны  $\lambda = 427$  нм.

Таким образом, разработана термокапиллярная модель воздействия низкоэнергетических сильнофокусированных электронных пучков на металлы. Получено дисперсионное уравнение, которое приводится к алгебраическому уравнению 16-й степени и определена критическая длина волны.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект №14-08-00506а и 15-08-03411а), гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых - докторов наук (проект МД-2920.2015.8) и государственного задания № 3.1496.2014/К.*

## **ЗАВИСИМОСТЬ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ОТ СТРУКТУРНЫХ ФАКТОРОВ ЛИТОГО БЕРИЛЛИЯ**

**И.И.Папиров, А.А.Николаенко, А.И. Пикалов, П.И.Стоев,  
Т.Г. Емлянинова, \*Ю.В. Тузов**

*ННЦ “Харьковский физико-технический институт”,  
Украина, 61108, г.Харьков, ул.Академическая, 1.  
nikolaenko@kipt.kharkov.ua*

*\*Высокотехнологичный Научно-исследовательский Институт  
Неорганических Материалов имени академика А.А. Бочвара, Москва*

Использование бериллия в качестве конструкционного материала в различных областях техники предъявляет особые требования к уровню его физико-механических характеристик.

В данной работе была поставлена задача детально изучить влияние структурных факторов (содержание и состояние примесей, размер зерна, текстура) и технологических параметров (температура, давление и время обработки) на уровень механических свойств литого бериллия и на основе такого анализа разработать новые бериллиевые материалы с повышенным уровнем механических свойств.

Приведены экспериментальные результаты исследования литых бериллиевых материалов, которые отличались содержанием примесей, величиной зерна и текстурой. Эти материалы готовили на основе бериллия высокой чистоты, полученного методом многократной дистилляции. Целью работы было систематическое изучение свойств литого деформированного бериллия в зависимости от чистоты, размера зерна и некоторых других факторов [1].

Систематически изучены механические характеристики литого прокатанного бериллия в зависимости от структурных факторов. У всех изученных сортов бериллия пределы прочности и текучести существенно повышаются, а относительное удлинение возрастает с уменьшением размера зерна [2]. Пластические характеристики исследованного металла возрастают по мере увеличения чистоты.

В литом состоянии бериллий обладает относительно низкими механическими свойствами: предел прочности при растяжении составляет 34-38 МПа при практически нулевой пластичности. Снижение концентрации металлических примесей при переходе от менее чистого к более чистому материалу приводит к заметному росту пластичности.

Глубокой очисткой и последующей интенсивной деформацией можно получить достаточно пластичный мелкозернистый бериллий, однако производство такого материала сдерживается высокой стоимостью технологического процесса и сложностями получения крупных заготовок.

1. Л.А. Корниенко, А.А. Николаенко, И.И. Папилов, П.И. Стоев, Ю.В. Тузов, А.М. Хомутов. Атлас структур бериллия, Дубна, 2009.
2. Papirova I.I., Tikhinskij G.F. Modern Investigations of Beryllium, Kharkov, 1998, — 228 p.

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФFUЗИОННОГО МАССОПЕРЕНОСА В СПЛАВАХ ПРИ ВЫСОКИХ ДОЗАХ ИОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ**

**В. А. Печенкин, А. Д. Чернова, В. Л. Молодцов**

*Россия, Обнинск, Государственный научный центр Российской  
Федерации – Физико-энергетический институт*

*var@ipre.ru*

Ускорители являются важным инструментом для моделирования радиационных эффектов в перспективных конструкционных материалах для реакторов деления и синтеза при высоких повреждающих дозах. Однако при анализе облученных сплавов следует учитывать ряд особенностей ионного облучения, включая радиационно-индуцированную сегрегацию (РИС) и накопление внедренных ионов. При пространственно однородном (например, нейтронном) облучении РИС приводит к значительному изменению состава сплава возле основных объектов микроструктуры (стоков точечных дефектов): границ зерен и поверхности образца, дислокаций, выделений, пор – и оказывает сильное влияние на фазовый состав, набухание и другие радиационные явления. При ионном облучении РИС проявляется также в областях сильной неоднородности скорости генерации точечных дефектов (ТД).

В данной работе развита модель неравновесной радиационно-индуцированной сегрегации в сплавах вдоль проективного пробега при ионном облучении с учетом неоднородного профиля скорости генерации ТД и накопления внедренных ионов. Проведено моделирование РИС в сплавах Fe-Cr-Ni (ГЦК) и Fe-Cr-Si (ОЦК) при облучении ионами Ni<sup>+2</sup> с энергией 7 МэВ и Cr<sup>+3</sup> с энергией 1.8 МэВ. Предложенный подход применен также для

анализа опубликованных данных по облучению стали F82H ионами никеля с энергией 4 МэВ.

**ВЫРАЩИВАНИЕ ВЫСОКООДНОРОДНЫХ  
КРИСТАЛЛОВ ПОЛУПРОВОДНИКОВ: КОСМИЧЕСКИЕ  
ИССЛЕДОВАНИЯ И НАЗЕМНЫЕ АЛЬТЕРНАТИВЫ**  
**Серебряков Ю.А., Захаров Б.Г., Сидоров В.С., Прохоров И.А.,  
Коробейникова Е.Н., Власов В.Н., Артемьев В.К., Фоломеев  
В.И.**

*<sup>1</sup>Россия, Калуга, НИЦ "Космическое материаловедение"*

*Филиал ФГБУН Института кристаллографии*

*им. А.В. Шубникова РАН*

*<sup>2</sup>Россия, Обнинск, ФГУП ГНЦ РФ-ФЭИ.*

*kmikran@spark-mail.ru*

Повышение макро- и микрооднородности распределения легирующей примеси и совершенства структуры в выращиваемых монокристаллах полупроводников являются одними из важнейших задач материаловедения. С развитием субмикронной- и наноэлектроники эта проблема становится еще более актуальной. Для воспроизводимости параметров микросхем пространственные размеры микронеоднородностей свойств в выращиваемых кристаллах, на подложках из которых формируются микросхемы, должны быть такого же порядка величины. Применение высокосовершенных и высокооднородных материалов позволяет значительно улучшить функциональные характеристики электронных устройств.

Решение проблемы однозначно связано с управлением процессами тепломассопереноса в расплаве таким образом, чтобы обеспечить получение необходимых качественных показателей. Сильная термогравитационная конвекция в расплавах приводит к нестабильности параметров роста и



появлению микронеоднородностей распределения примеси в виде полос роста с периодом расположения в несколько десятков микрон. Минимизация конвективных процессов в расплаве позволяет значительно повысить качество выращиваемых кристаллов. В пределе приближение к диффузионным условиям тепломассопереноса дает возможность проводить рост монокристаллов на основе самоорганизации структурных элементов и получать более однородные кристаллы.

Такие условия могут осуществляться при выращивании кристаллов полупроводников в условиях микрогравитации на борту космических аппаратов при практическом отсутствии термогравитационной конвекции. Космические эксперименты продемонстрировали возможность получения в условиях микрогравитации кристаллов полупроводников с уникальными характеристиками микрооднородности. Однако новая технологическая среда оказалась более сложной, чем представлялось ранее. Многочисленные специфические факторы орбитального полета КА (остаточные квазистационарные микроускорения, вибрации, сложный характер изменения малых массовых сил), в также доминирующая роль конвекции Марангони оказывают заметное влияние на процесс кристаллизации и осложняют получение совершенных и однородных кристаллов.

Разработанные технические и технологические подходы с учетом результатов математического моделирования процессов тепломассопереноса в расплавах  $\text{Ge:Ga}$  и  $\text{GaSb:Te}$  позволили минимизировать вышеперечисленные возмущающие воздействия для получения высокооднородных кристаллов в космосе. Применение полученных знаний позволило оптимизировать условия кристаллизации и в наземных условиях при росте легированных кристаллов германия и антимонида галлия вертикальным методом Бриджмена с осесимметричным

подводом тепла сверху. При этом в расплаве значительно ослабляется термогравитационная, термокапиллярная и вибрационная виды конвекции и формируются близкие к диффузионным условия переноса, необходимые для получения высокосвершенных монокристаллов.

*Исследования проведены при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Правительства Калужской области (проект № 14-42-03034)».*

## **ЖЕСТКАЯ ПОТЕРЯ УСТОЙЧИВОСТИ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ МОНОКРИСТАЛЛОВ ПАРАТЕЛЛУРИТА**

**Скворцова Н.П.**

*Институт кристаллографии РАН, Москва*

*skvortsova49@mail.ru*

Представлены результаты экспериментального исследования механического поведения и особенностей деформирования монокристаллов  $\alpha$ -TeO<sub>2</sub>, выращенных методом Чохральского. Образцы, ориентированные вдоль кристаллографических направлений [100], [110] и [221], деформировались одноосным сжатием в интервале температур  $T = 733\text{--}993$  К с постоянной скоростью деформирования  $\dot{\epsilon} = 1.05 \times 10^{-4}$  с<sup>-1</sup>. Получены диаграммы “напряжение – пластическая деформация”  $\sigma(\epsilon)$ , из которых определялись предел упругости  $\sigma_e$ , верхний и нижний пределы текучести (“зуб текучести”), протяженность стадии зуба текучести  $\epsilon^*$ , величина прочности  $\sigma_f$  (максимальное деформирующее напряжение, вызывающее разрушение образца) и пластическая деформация перед разрушением  $\epsilon_f$  деформированных образцов. В ходе деформирования измерялись также критические параметры перехода к локализованному течению ( $\epsilon_{cr}$ ,  $\sigma_{cr}$ ) и величина коэффициента деформационного разупрочнения  $\theta = \partial\sigma/\partial\epsilon$ . Показано, что для ориентации  $\sigma \parallel [100]$

величина  $\sigma_e$  уменьшалась от  $\sim 146$  до  $77$  МПа в интервале температур от  $893$  до  $980$  К. С ростом температуры деформации величина  $\sigma_e$  уменьшалась от  $\sim 120$  до  $30.4$  МПа для образцов, ориентированных вдоль направления  $[110]$ , и от  $\sim 114$  до  $24$  МПа для  $\sigma \parallel [221]$ . Выявлено двукратное уменьшение прочности образцов, ориентированных вдоль  $[100]$ , в пределах от  $\sim 160$  до  $\sim 84$  МПа в области температур  $T = 893-980$  К. Показано, что значения  $\sigma_f$  образцов, ориентированных вдоль осей  $[110]$  и  $[221]$ , совпадают в пределах погрешности измерений, и уменьшаются от  $\sim 130$  до  $100$  МПа в интервале температур  $T = 733-850$  К. Заметных проявлений пластической деформации в указанных температурных интервалах не наблюдалось. В работах [1, 2] зарегистрирован упруго-пластический переход при температуре  $T_{ep} \approx 900$  К для образцов, ориентированных вдоль  $[110]$  и  $[221]$ . При  $T \geq 900$  К пластическая деформация перед разрушением  $\epsilon_f$  резко возрастает примерно на порядок. Кривые деформации  $\sigma(\epsilon)$  имеют прерывистый немонотонный характер. Средние значения относительных амплитуд  $\langle \Delta\sigma/\sigma \rangle$  скачков, соответствующих локальным сдвигам в полосах локализованного сдвига (ПЛС), изменяются в пределах от десятых долей процента до  $\sim 1\%$  для образцов, ориентированных вдоль направлений  $[110]$  и  $[221]$ . Величина “зуба” текучести составляет  $\sim 5\%$  от значения предела текучести. Наблюдаемые проявления неустойчивости пластического течения являются следствием катастрофического разупрочнения в ПЛС. Показано, что для кристаллов с ориентацией оси сжатия вдоль  $[221]$  способность к разупрочнению существенно выше, чем в кристаллах, ориентированных вдоль направления  $[110]$ . Взаимосвязанные коллективные эффекты на макро- и мезоскопическом уровнях приводят к установлению нового упорядоченного во времени и пространстве динамического состояния - самосогласованного пластического течения в ПЛС.

[1] Скворцова Н.П., Ломонов В.А., Виноградов А.В. Рост и механические свойства монокристаллов парателлурита при высоких температурах. Кристаллография. 2011. Т. 56, № 1. С. 72-76.

[2] Скворцова Н.П. Высокотемпературная локализация пластической деформации и разрушение монокристаллов парателлурита. Вестник Тамбовского государственного университета. Серия: Естественные и технические науки. 2013. Т. 18. № 4. Ч. 2. С. 1652-1654.

**ВЛИЯНИЕ КОЛИЧЕСТВА БОРА НА  
СТЕКЛООБРАЗУЮЩУЮ СПОСОБНОСТЬ АМОРФНЫХ  
СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА ПРИ  
МЕХАНОАКТИВАЦИИ**

**Дьяконова Н.П., Захарова Е.А., Свиридова Т.А.**

*НИТУ МИСис, г. Москва, Россия,*

*nemezia27@rambler.ru*

Целью работы было выяснение влияния количества бора на скорость аморфизации сплавов на основе железа, методом механохимического синтеза (МС).

В качестве исходных реагентов использовались элементарные порошки железа и бора в разных пропорциях. (80:20; 67:33; 50:50). Бор использовался кристаллический и аморфный.

МС проводилось в высокоэнергетической мельнице АГО-2У, в атмосфере аргона или гелия, полученные порошки исследовались методами рентгеноструктурного и термического анализа, стеклообразующая способность сплавов оценивалась по скорости и полноте перехода в аморфное состояние.

Наибольшая наибольшая склонность к аморфизации была обнаружена при введении повышенного содержания бора. Анализ микроструктур (СЭМ) показал наличие непрореагировавшего бора.

## КОМБИНАЦИОННОЕ И ФОТОИНДУЦИРОВАННОЕ РАСSEЯНИЕ СВЕТА В КРИСТАЛЛАХ НИОБАТА ЛИТИЯ

Теплякова Н.А., Сидоров Н.В., Палатников М.Н.

*Россия, Апатиты, ФГБУН Институт химии и технологии  
редких элементов и минерального сырья им. И.В. Тананаева*

*Кольского научного центра РАН*

*tepl\_na@chemy.kolasc.net.ru*

Методами фотоиндуцированного рассеяния света (ФИРС), лазерной коноскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС) исследованы кристаллы  $\text{LiNbO}_{3\text{конг}}$ ;  $\text{LiNbO}_3(4.5 \text{ вес. \% K}_2\text{O})$ ;  $\text{LiNbO}_3(6 \text{ вес. \% K}_2\text{O})$ ;  $\text{LiNbO}_{3\text{стех}}$ . Показано, что для кристаллов  $\text{LiNbO}_{3\text{конг}}$  и  $\text{LiNbO}_3(4.5 \text{ вес. \% K}_2\text{O})$  индикатриса ФИРС не раскрывается, а наблюдается только круговое рассеяние на статических структурных дефектах. Центральный слой спекл-структуры картины ФИРС кристалла  $\text{LiNbO}_{3\text{конг}}$ , соответствующий сечению лазерного луча, практически полностью пропадает в течение первых 30 секунд после начала облучения кристалла. Это указывает на то, что энергия луча диссипирует на дефектах в объеме кристалла. Такое поведение кристалла  $\text{LiNbO}_{3\text{конг}}$  делает его перспективным материалом для оптических затворов. Для кристаллов  $\text{LiNbO}_3(6 \text{ вес. \% K}_2\text{O})$  и  $\text{LiNbO}_{3\text{стех}}$  индикатриса ФИРС раскрывается в первые секунды облучения, угол раскрытия составляет  $46^\circ$  ( $\text{LiNbO}_3(6 \text{ вес. \% K}_2\text{O})$ ) и  $56^\circ$  ( $\text{LiNbO}_{3\text{стех}}$ ). Быстрота раскрытия индикатрисы ФИРС делают кристаллы  $\text{LiNbO}_3(6 \text{ вес. \% K}_2\text{O})$  и  $\text{LiNbO}_{3\text{стех}}$  перспективным материалом для электрооптических модуляторов и затворов. Исследование оптической однородности кристаллов методом лазерной коноскопии показало достаточно высокое оптическое качество кристаллов  $\text{LiNbO}_{3\text{конг}}$  и  $\text{LiNbO}_3(4.5 \text{ вес. \% K}_2\text{O})$ . Для кристаллов  $\text{LiNbO}_3(6 \text{ вес. \% K}_2\text{O})$  и  $\text{LiNbO}_{3\text{стех}}$  обнаружена значительная оптическая неоднородность,

усиливающаяся при увеличении мощности лазерного излучения до 90 мВт, что связано со значительным ФИРС в этих кристаллах.

Для исследования структурных особенностей кристаллов были использованы спектры КРС. Исследование ширины линий в спектрах кристаллов  $\text{LiNbO}_3(6 \text{ вес. } \% \text{ K}_2\text{O})$  и  $\text{LiNbO}_{3\text{стех}}$  свидетельствует о таком же высоком упорядочении катионной подрешетки кристалла  $\text{LiNbO}_3(6 \text{ вес. } \% \text{ K}_2\text{O})$ , как и  $\text{LiNbO}_{3\text{стех}}$ . Однако интенсивности всех линий в спектре кристалла  $\text{LiNbO}_3(6 \text{ вес. } \% \text{ K}_2\text{O})$  существенно меньше, чем для кристалла  $\text{LiNbO}_{3\text{стех}}$ . Очевидно, наряду с процессом упорядочения в катионной подрешетке кристалла  $\text{LiNbO}_3(6 \text{ вес. } \% \text{ K}_2\text{O})$  происходит увеличение дефектности кристалла в целом. Для кристаллов  $\text{LiNbO}_3(4.5 \text{ вес. } \% \text{ K}_2\text{O})$  и  $\text{LiNbO}_{3\text{конг}}$  обнаружена более высокая степень структурного разупорядочения катионной подрешетки и более сильная деформация кислородного каркаса, что обуславливает наличие в них большего количества заряженных собственных дефектов, создающих глубокие уровни захвата в запрещенной зоне. При этом высокоупорядоченные кристаллы  $\text{LiNbO}_{3\text{стех}}$  и близкие к ним  $\text{LiNbO}_3(6 \text{ вес. } \% \text{ K}_2\text{O})$ , но растущие с неоднородным составом и показателем преломления вдоль полярной оси (что очевидно обуславливает значительный угол раскрытия индикатрисы ФИРС), имеют большое количество пространственных дефектов и связанных с ними мелких электронных ловушек, которые вероятно и делают возможной запись информации в стехиометрических кристаллах.

Полученные результаты могут быть использованы для создания лазерным излучением в кристаллах  $\text{LiNbO}_3(6 \text{ вес. } \% \text{ K}_2\text{O})$  и  $\text{LiNbO}_{3\text{стех}}$  периодически поляризованных доменов субмикронных размеров с плоскими границами для преобразования лазерного излучения и активно-нелинейных лазерных сред.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ на поддержку ведущих научных школ НШ-487.2014.3 и гранта РФФИ 12-03-00515-а.

## **КИНЕТИКА ОБРАЗОВАНИЯ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА В ОБРАТНЫХ МИЦЕЛЛАХ**

**Д.Л.Тытик<sup>1)</sup>, С.А.Бусев<sup>1)</sup>, А.А.Ревина<sup>1)</sup>, В.И.Кузьмин<sup>2)</sup>,  
А.Ф.Гадзаов<sup>2)</sup>**

*<sup>1)</sup>Москва, Институт физической химии и электрохимии  
им. А.Н. Фрумкина РАН*

*<sup>2)</sup>Московский государственный университет информационных  
технологий, радиотехники и электроники  
dtytik@rambler.ru*

Предложен метод анализа эволюции спектров оптического поглощения, наблюдаемых при синтезе наночастиц серебра в обратных мицеллах (микрореакторы). В качестве базовой модели использована кинетическая модель “хищник–жертва” Вольтерры. Показано, что предельные решения этой модели представлены кривыми контролируемого роста (логистическая модель, модель Гомперца), параметры которых определяются характеристиками процессов на микроуровне.

Показано наличие физически интерпретируемых параметров процесса синтеза, относящихся к макроуровню. Проверка моделей на устойчивость к фазовому сдвигу (релаксации) позволила определить его взаимосвязь с параметрами моделей контролируемого роста. Показана взаимосвязь между пространственно-временными характеристиками системы (время, длина волны) и определены моменты смены стадий реакции синтеза наночастиц.

Предложен метод анализа тонкой структуры спектров оптического поглощения, основанный на выделении из них

колебательных составляющих. Выявлены почти-периоды в колебательной составляющей спектра поглощения обратномиллелярной системы с наночастицами серебра. Показана взаимосвязь почти-периодов с характеристиками интегральной модели кинетики синтеза наночастиц серебра. Работа частично поддержана грантом Минобрнауки № 3481 «Фильтр».

## **КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЗАЛЕЧИВАНИЯ ТРЕЩИН ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ**

**Ушаков И.В.<sup>1,2</sup>, Батомункуев А.Ю.<sup>1</sup>**

*Российская Федерация, Москва, НИТУ МИСиС<sup>1</sup>,*

*Российская Федерация, Тамбов, Тамбовский государственный  
технический университет<sup>2</sup>*

*amgalan-ngu-621@yandex.ru; ushakoviv@mail.ru*

Компьютерное моделирование открывает дополнительные возможности для исследования ряда процессов в наноструктурных материалах, непосредственное изучение которых, в настоящее время, труднодоступно из-за технических сложностей или затрат на ресурсы, необходимые для проведения полномасштабных экспериментов. Указанные проблемы возникают при изучении некоторых процессов в тонкой пленке аморфно-нанокристаллического металлического сплава, иницированных лазерным импульсом с высокой плотностью мощности. К таким процессам относится лазерно-стимулированное залечивание трещин.

Компьютерное моделирование не может охватить процесс лазерно-стимулированного залечивания трещин полностью. Моделирование делится на отдельные этапы: во-первых, определяем особенности залечивания, во-вторых, выделяем



ключевые характеристики модели. Отметим, что поверхности трещины в аморфно-нанокристаллическом металлическом сплаве имеют сложный рельеф, вершины трещин могут иметь различные углы раскрытия и пр. Соответственно, особенности рельефа будут определяться случайным образом. Признаком залечивания трещин будет считаться сближение и схлопывание берегов трещины. Непосредственно процесс схлопывания берегов трещины вызывается шокowym давлением, а в предложенной модели данный процесс связывается с работой, затраченной на пластическое деформирование материала.

С использованием модернизированного варианта программы для компьютерного моделирования процесса залечивания в тонкой пленке аморфно-нанокристаллического металлического сплава [1], получен ряд новых данных. Уточнена зависимость вероятности залечивания трещин с малым углом при вершине от характеристик материала и формы трещин. Показано, что для всех трещин вероятность залечивания возрастает при использовании серии лазерных воздействий на материал. При воздействии серии лазерных импульсов рельеф поверхности материала меняется как вследствие пластической деформации, так и под воздействием высоких температур.

В целом, в результате залечивания микро- и нано- дефектов может увеличиваться (при сохранении исходной структуры) как микротвердость материала, так и его пластические характеристики. То есть, наблюдается улучшение комплекса механических характеристик. Повышение механической прочности образца также связано с релаксацией механических напряжений в вершинах трещин.

Одним из подтверждений соответствия результатов компьютерного моделирования реальным данным, можно считать экспериментально установленное явление одновременного возрастания как микротвердости, так и вязкости

разрушения в лазернообработанных участках тонких лент аморфно-нанокристаллических металлических сплавов [2].

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Ушаков И.В., Сафронов И.С. Свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ № 2014610797 «Компьютерное моделирование неоднородностей рельефа поверхностей трещин в наноструктурном материале «COMP\_SIM\_RELIEF\_SURFACE\_CRACKS»». Зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ 17.01.2014 г.

2. Ушаков И.В., Сафронов И.С. Влияние лазерной обработки на микротвердость и особенности разрушения тонких лент аморфно-нанокристаллического металлического сплава // Физика и химия обработки материалов. 2013. № 2. С. 11-15.

### **НАНОСТРУКТУРИРОВАНИЕ МЕТАЛЛОВ КРИОДЕФОРМИРОВАНИЕМ ПРИ ВСЕСТОРОННЕМ СЖАТИИ**

**Хаймович П.А.**

*ННЦ «Харьковский физико-технический институт»,  
Украина, 61108, г.Харьков, ул.Академическая, 1. pavel.41@bk.ru*

Человечество имеет большой опыт пластического деформирования металлов, как для изменения формы, так и для придания им тех или иных физико-механических свойств. Методов такого воздействия было разработано много, но объединяет их то, что до недавнего времени осуществлялись эти воздействия в диапазоне температур от комнатной до температуры плавления. Их можно назвать методами деформирования в традиционных условиях (рис. 1, область I).

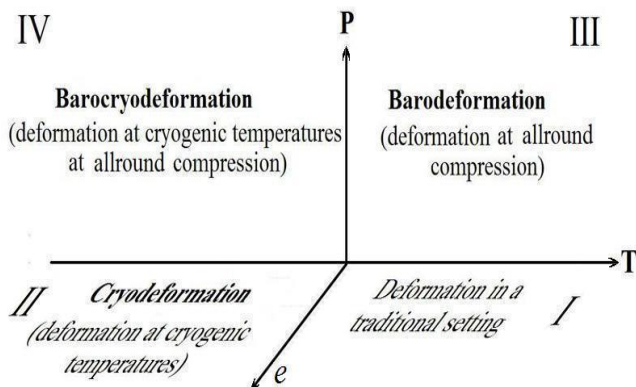


Рис. 1. Четыре континента мира деформирования металлов (Т - температура, при которой проводится деформирование,  $e$  - степень деформации, P - уровень всестороннего сжатия деформируемого объекта).

В начале-середине XX века получили начало и развитие второй и третий континенты в "мире деформации" – криодеформирование и бародеформирование. Но принципиальные ограничения, не позволяющие в полной мере реализовать возможности пластического деформирования в деле повышения дисперсности структуры деформируемого металла заставили искать выход на "территории" четвертого континента "мира деформации", где материал подвергается деформированию при криогенных температурах в условиях всестороннего сжатия.

*P.A. Khaimovich. Metal Nanostructuring through Cryodeformation under All-Round Compression. " Handbook of Mechanical Nanostructuring". Published 2015 by Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA. pp.435-448.*

## **ВЛИЯНИЕ ПРИЛОЖЕНИЯ СИЛ ВСЕСТОРОННЕГО СЖАТИЯ ПРИ КРИОГЕННЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ НА СВОЙСТВА СПЛАВА ВТ1-0**

**П.А. Хаймович, Е.В. Черняева\*, Н.А. Шульгин**

ННЦ «Харьковский физико-технический институт»,

Харьков, Украина

pavel.41@bk.ru

\*Санкт-Петербургский государственный университет,  
Санкт-Петербург, Российская Федерация

До настоящего времени остается дискуссионным вопрос, приводит ли к необратимым изменениям в структуре и механических свойствах материала сам факт приложения к нему сил всестороннего сжатия без его деформирования. Такие эксперименты проводились [1], но при комнатной температуре. В настоящей же работе с применением метода барокриодеформирования предпринята попытка найти ответ на этот вопрос для случая приложения к металлу сил всестороннего сжатия в условиях криогенных температур.

Эксперименты были организованы таким образом, что после прохождения матрицы частью заготовки продавливание останавливали, устройство разгружали и извлекали частично продеформированную заготовку. Особенностью получаемого объекта было то, что часть его не испытала пластической деформации продавливанием через матрицу, однако находилась под действием сил всестороннего сжатия при 77 К, а вторая часть продавлена при этой температуре (степень деформации ~ 53%).

Полученные с помощью измерений микротвердости результаты свидетельствуют о том, что механические характеристики металла, практически изотропного в исходном состоянии, в пределах точности измерений не изменяет факт приложения к металлу усилий всестороннего сжатия вплоть до

15...18 кбар, осуществляемого при криогенной температуре. Тем не менее, как следует из данных, полученных методами АЭ, пребывание в таких условиях не проходит для металла бесследно. Но как повышение энергии АЭ, так и рост медианной частоты могут свидетельствовать не о тех или иных деформационных процессах, а наоборот – об уменьшении плотности дефектов в приповерхностных слоях прутка, находившегося в условиях всестороннего сжатия. Однако механизм таких релаксационных процессов неясен.

1. В.И. Зайцев. *Физика пластичности гидростатически сжатых кристаллов*. Киев: «Наукова думка», 1983, 188 с.

## **МЕТАСТАБИЛЬНЫЙ ХАРАКТЕР АМОРФНОГО ЛЬДА ВБЛИЗИ ТОЧКИ ПЛАВЛЕНИЯ**

**Чубаров В.В, Сионов В.М.**

*Россия, Москва, МГУ имени М.В.Ломоносова*

*chub-rov@mail.ru*

### **Введение**

Структура воды позволяет создание множества уникальных природных форм. Так при охлаждении ниже  $0^{\circ}\text{C}$  сверхчистая вода без зародышевых центров или примесей может и не кристаллизоваться в виде стабильной фазы гексагонального льда  $I_h$  при температуре гомогенной нуклеации  $T_H$ , а остаться в форме переохлажденной воды вплоть до температуры  $\sim 231\text{K}$  при нормальном давлении [1]. При дальнейшем охлаждении и достижении температуры стеклования  $T_g$  возникает структура в виде твердого аморфного льда, в котором кристаллическая и случайная сетки атомов сосуществуют вместе. Изучение подобной структуры представляет собой сложную задачу для физики конденсированных сред. Точное определение величины  $T_g$  явилось предметом многолетних исследований и активной

полемики. В настоящее время принято  $T_g \sim 136\text{K}$ , как результат калориметрических экспериментов с аморфными льдами при нормальном давлении [2].

Диапазон температур между  $T_H$  и  $T_g$  в иностранной литературе принято называть “no man’s land” (неизведанной областью). В этой области переохлажденная вода спонтанно замораживается ниже температуры  $T_H$ , а аморфный лед быстро кристаллизуется при температуре выше  $T_g$ . Эксперименты в этой области не выполняются, поскольку требуют сверхбыстрых миллисекундных методов регистрации параметров жидкой воды [3]. В зависимости от способа приготовления аморфных льдов в литературе различаются ASW (amorphous state water), полученные, в основном, при охлаждении водяных паров на низкотемпературных подложках и HGW (hyperquenched glass water), полученные в результате быстрого закаливания воды. Свойства и параметры подобных аморфных структур подробно рассматриваются в обзоре [4].

В 1984 году впервые из гексагонального льда  $I_h$  при температуре 77K и давлении 1ГПа получен аморфный лед высокой плотности HDA (high-density amorphous) «плавлением» кристаллического гексагонального льда ниже температуры стеклования  $T_g$  [5]. Эта работа положила начало новому направлению исследований льдов и их взаимных превращений при высоких давлениях (порядка 1ГПа) и низких температурах (ниже 77K).

Многочисленные переходы между аморфными состояниями водного льда и его различными стабильными и метастабильными кристаллическими состояниями подробно рассмотрены в обзоре [6]. Анализ существующей научной литературы приводит к мысли, что в настоящее время исследования по этому вопросу проходят только этап накопления информации без его теоретического осмысления.

Полученные результаты во многом определяются способами подготовки образцов, режимами проведения экспериментов и применяемыми методами исследования. Из большого количества обзоров по различным состояниям водного льда можно сделать единственный неоспоримый вывод, что при нагревании все существующие кристаллические и аморфные формы водного льда последовательно переходят при нормальном давлении в метастабильный кубический лед  $I_c$ , а затем в стабильное состояние лед  $I_h$ .

Однако, в [7] было показано, что наличие диффузного рассеяния рентгеновских лучей льдом вблизи точки плавления при нормальных условиях является характерным признаком присутствия аморфной фазы в гексагональной структуре льда. Данная работа посвящена исследованию метастабильных состояний подобной аморфной фазы льда воды.

#### Методика измерений

Для исследования диффузного рассеяния рентгеновских лучей льдом при температурах близких к температуре плавления была разработана прецизионная низкотемпературная полуавтоматическая приставка к рентгеновскому дифрактометру [8]. Методика проведенных измерений аналогична методике, подробно описанной в работе [9].

#### Результаты

Ранее, в [7] в результате рентгенографических исследований льда вблизи точки плавления было выявлено диффузное рассеяние рентгеновских лучей. Поскольку интенсивность диффузного рассеяния на несколько порядков меньше интенсивности рефлексов, регистрация диффузного рассеяния требует применения высокочувствительного дифрактометра. Для исследования структурных характеристик диффузного рассеяния была проведена серия многочисленных экспериментов.

На образце льда, приготовленного из дистиллированной воды, долговременно в течение двух недель поддерживалась температура  $-10^{\circ}\text{C}$  и через определенное время регистрировались рентгенограммы.

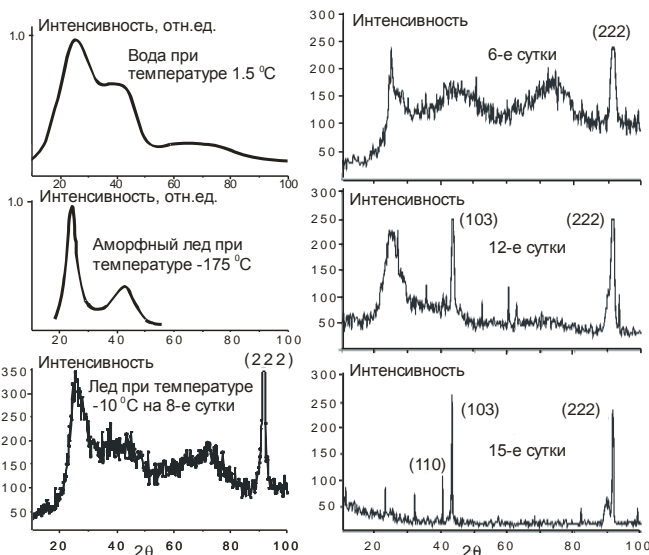


Рис.1. Сравнение рентгенограмм диффузного рассеяния полученных в разное время различных образцов для образца льда при  $-10^{\circ}\text{C}$ .

Наличие некристаллической аморфной составляющей в образце подтверждается на Рис.1 совпадением рентгенограмм для воды при температуре  $1.5^{\circ}\text{C}$  [10], для аморфного льда, полученного осаждением паров воды на холодной подложке при температуре  $-175^{\circ}\text{C}$  [11] и для исследуемого образца на восьмые сутки регистрации. Присутствие только одного рефлекса можно объяснить формированием вместе с аморфной фазой нескольких, довольно крупных кристалликов льда  $I_h$ , для которых условия регистрации являются неоптимальными.

На протяжении двух недель один и тот же образец, находящийся постоянно при температуре  $-10^{\circ}\text{C}$ , исследовался



на дифрактометре через определенные промежутки времени. В результате получена серия рентгенограмм, некоторые из которых приведены на Рис.2. Видно, что диффузные максимумы, наблюдавшиеся при  $40^{\circ}$  и  $70^{\circ}$  по  $2\theta$ , постепенно исчезают и перекачиваются в область  $24^{\circ}$  по  $2\theta$ , практически сохраняя величину интенсивности рассеяния. На некоторых рентгенограммах возникают интенсивные рефлексы гексагонального льда, что можно объяснить удачным для регистрации положением формирующихся монокристаллов льда. На 15-е сутки наблюдается исчезновение диффузного рассеяния до уровня остаточного рассеяния рентгеновских лучей на воздухе. При этом происходит полное образование кристаллической фазы образца. Отсутствие других рефлексов гексагонального льда связано, по-видимому, с неоптимальным расположением сформированных монокристаллов гексагонального льда.

#### Заключение

В результате исследований подтверждено сосуществование аморфной и кристаллической гексагональной структуры льда при нормальном давлении вблизи точки плавления. На дифрактограммах образца льда, поддерживаемого длительное время при постоянной температуре  $-10^{\circ}\text{C}$ , выявлено непрерывное изменение характера диффузного рассеяния с перераспределением интенсивностей из одних максимумов в другие. Через две недели диффузное рассеяние исчезает и происходит полная кристаллизация образца льда. Подобное исчезновение диффузного рассеяния свидетельствует о метастабильности аморфного льда со временем жизни около 15 суток. В дальнейшем представляют интерес исследования статических и динамических структурных деформаций гексагонального льда при температуре, близкой к температуре фазового перехода.

## Литература

1. C.A.Angell, J.Shuppert, J.C.Tucker//J.Phys.Chem., 1973,77, 3092.
2. M.S.Elsaesser, K.Winkel, E.Mayer,T.Loerting//Phys.Chem. Chem. Phys., 2010, **12**, 708.
3. O.Mishima, E.Stanley//Nature 1998,**396**,p.329. doi:10.1038/24540.
4. P. G. Debenedetti.// J. Phys.: Condens. Matter, 2003, **15**, R1669.
5. O.Mishima, L.D.Calvert,E.Whalley //Nature. 1984,**310**, P.393. doi:10.1038/310393a0.
6. T.Loerting, et.al.//J. Phys.Chem.Chem.Phys., 2011, **13**, 8783. doi: 10.1039/C0CP02600J
7. В.М.Силонов, В.В.Чубаров.//ВМУ, серия 3,физика астрономия, 2011, №4, С.48.
8. В.М.Силонов, В.В.Чубаров.// Препринт №2/2013. М.:Изд-во МГУ, Физ. ф-т, 2013,7с.
9. В.М.Силонов, В.В.Чубаров//Поверхность, рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2014, №5, с.1.
10. J. Morgan, В.Е. Warren // J.Chem.Phys., 1938, v.6, P.666.
11. L.G.Dowell, А.Р.Rinfret.// Nature, 1960, v.188, P.1144.