

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ФИЗИКА ТВЁРДОГО ТЕЛА

Сборник материалов
XIX Российской студенческой конференции,
посвященной 85-летию кафедры физики твёрдого тела
физического факультета ТГУ
(13–17 мая 2024 г.)

Томск
Издательство Томского государственного университета
2024

УДК 539.2; 539.9; 537
ББК Г 534
Ф503

Ф503 Физика твердого тела: сборник материалов XIX Российской студенческой конференции, посвященной 85-летию кафедры физики твёрдого тела физического факультета ТГУ (13–17 мая 2024 г.) / под ред. Д.А. Осипова. – Томск : Изд-во ТГУ, 2024. – 132 с.

ISBN 978-5-907722-83-5

Сборник содержит материалы, представленные студентами, аспирантами и молодыми учеными на XIX Российской студенческой конференции «Физика твердого тела» (ФТТ-2024). Тематика сообщений посвящена исследованию электронного строения, кристаллической структуры, фазовых переходов, электрофизических, поверхностных, оптических и механических свойств твердых тел.

Для широкого круга исследователей, занимающихся проблемами физики твердого тела.

**УДК 539.2; 539.9; 537
ББК Г 534**

Организаторы конференции:

Национальный исследовательский Томский государственный университет;
Институт физики прочности и материаловедения СО РАН;
Институт сильноточной электроники СО РАН;
Институт физики полупроводников СО РАН;

Редакционная коллегия:

д-р физ.-мат. наук Эрвье Ю.Ю.; д-р физ.-мат. наук Дитенберг И.А.; д-р физ.-мат. наук Мейснер Л.Л.; д-р физ.-мат. наук Литовченко И.Ю.; д-р физ.-мат. наук Дмитриев А.И.; д-р физ.-мат. наук Панченко Е.Ю.; д-р физ.-мат. наук Шилько Е.В.; канд. физ.-мат. наук Бобровникова И.А.; канд. физ.-мат. наук Аникеев С.Г.; канд. физ.-мат. наук Арпихова Н.В.; канд. физ.-мат. наук Ефтифеева А.С.; канд. физ.-мат. наук Корчуганов А.В.; канд. физ.-мат. наук Никонов А.Ю.; канд. физ.-мат. наук Осипов Д.А.; канд. физ.-мат. наук Остапенко М.Г.; канд. техн. наук Смирнов И.В.; канд. физ.-мат. наук Сёмин В.О.;

ISBN 978-5-907722-83-5

СОДЕРЖАНИЕ

Агафонов Г.О., Сулиз К.В. Наночастицы многокомпонентного оксида $(\text{FeNiCoCrCu})_x\text{O}_y$, полученные совместным электрическим взрывом проволок различных металлов/сплавов	8
Астапов Д.О. Микроструктура, фазовый состав и механические свойства многокомпонентных сплавов CoCrFeMnNi и CoCrNi	10
Березиков О.А. Исследование дефектной структуры концентрированных твёрдых растворов Ni-Fe-Cr после ионного облучения.....	12
Битенко С.А., Насырбаев А., Циммерман А.И. Разработка метода синтеза электрокаталитических материалов на основе карбида кремния	14
Большевич Е.А., Пахолкина С.А., Рыжакова В.Г. Коррозионная стойкость биосовместимых пористо-монолитных материалов на основе никелида титана в биологической среде	16
Волобуев А.С. Молекулярно-динамическое исследование механических характеристик покрытий системы TiAlTaSiN при варьировании концентрации компонентов.....	18
Ворсин О.И., Кукенов О.И. Изменение характера осцилляций картин ДБОЭ в зависимости от температуры при синтезе Si на Si(100)	20
Выродова А.В. Ориентационная зависимость механического поведения монокристаллов CrMnFeCoNi высокоэнтропийных сплавов при растяжении	21
Габдрахманов А.Ш., Подзывалов С.Н., Кальсин А.Ю. Спектральные и энергетические характеристики параметрических преобразователей частоты среднего ИК и ТГц диапазона на базе монокристаллических нелинейных соединений группы $\text{A}_2\text{B}_4\text{C}_5$	23
Гнеушев А.В., Дюков И.Ю. Сверхструктурные изменения на начальных стадиях напыления $\text{Ge/Si}(100)$ в широком интервале температур	25
Гомоля Б.В. Влияние температуры отжигов на микроструктуру и микротвердость сплава V-Ta-Cr-Zr после деформационного этапа термомеханической обработки	26
Гуртова Д.Ю. Закономерности формирования мартенсита в среднеэнтропийном сплаве $\text{Fe}_{40}\text{Mn}_{40}\text{Co}_{10}\text{Cr}_{10}$	28

Джамбулова Т.Д. Двухслойные электретные покрытия на основе фосфата кальция и оксинитрида титана	30
Дмитриенко М.С., Жердева М.В. Односторонний и двусторонний эффект памяти формы в [001]-монокристаллах $\text{Ni}_{54-x}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27}\text{Co}_x$ ($x = 10, 12, 15$) (ат. %).....	32
Елькин В.Д., Бобуёк С. Получение магнетита путем высокоэнергетической механической активации гематита в шаровой мельнице	34
Елькина Ю.С., Майдоров И.А. Синтез литиевых ферритов, модифицированных оксидом гадолиния	36
Жердева М.В. Ориентационная зависимость функциональных свойств в монокристаллах Ti-51.5 ат. \% Ni	38
Зобова А.А. Исследование зависимости плотности энергии изделия, полученного при помощи аддитивной технологии селективного лазерного плавления (SLM)	40
Иванова Е.К. Особенности высокотемпературного окисления интерметаллида Ni_3Al , обработанного воздействием низкоэнергетического сильнофокусированного электронного пучка.....	42
Иргизцев Д.Р. Электронно-микроскопический анализ микроструктуры сплава ВТ6, модифицированного радиально-сходящимся электронным пучком.....	44
Исхакова П.В. Картины локализованной пластичности при низких температурах	46
Ишков А.Д. Моделирование поверхностной сегрегации Ge при молекулярно-пучковой эпитаксии твердых растворов Ge-Si	48
Казаков А.И., Колесников Д.С., Добрянский А. Определение кристаллографических осей монокристаллического образца $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ с использованием голографической интерферометрии	50
Кальсин А.Ю., Лысенко А.Б., Габдрахманов А.Ш. Влияние лазерной закалки поверхности монокристаллов ZnGeP_2 на порог оптического пробоя.....	52
Ким А.В. Влияние отжига на выделение дисперсных частиц, микроструктуру и механические свойства высокоазотистой аустенитной стали ВНС-53-Ш-М	54

Клюкина Е.В., Ванькаев А.С. Исследование и моделирование процессов резистивного переключения в оксидных наноразмерных структурах титана	56
Куксаузен Д.А. Исследование сопротивления циклическим деформациям монокристаллов высокоэнтропийного сплава (TiZrHf) ₅₀ Ni ₂₅ Co ₁₀ Cu ₁₅ ПРИ 448 К	58
Курлевская И.Д., Тохметова А.Б. Модификация структуры и её влияние на сверхэластичность и эластокалорический эффект в поликристаллах сплава Ni ₅₄ Fe ₁₉ Ga ₂₇	60
Курчин К.Н. Моделирование характеристик нормально закрытого AlGaIn/GaN HEMT в пакете Sentaurus TCAD	62
Лобань В.В., Чепелев Д.В. Влияние электронно-ионно-пучковых обработок на деформационное поведение сплава TiNi при нагружениях кручением	64
Ломоносов Г.Д., Савельев Я.П., Зорин Д.Р. О проблеме анализа локальной структуры бинарных наночастиц Ti-V	66
Лысенко А.Б., Слюнько Е.С., Кальсин А.Ю. Влияние легирования халькогенами Se, Te, на оптические свойства дифосфида цинка-германия	67
Лысунец М.А., Астапов Д.О. Микроструктура и микротвердость интерметаллидного материала системы Ni-Cr-Al, полученного методом электронно-лучевого аддитивного производства	69
Митулинский А.С., Булах В.А. Периодическая ренуклеация как подход к улучшению трибологических свойств CVD алмазных покрытий	71
Мохоров Д.Д. Исследование образцов проката с дефектом «цветовые оттенки (желтизна)»	73
Нифонтов А.С. Влияние режима изотермического отжига на микроструктуру и микротвердость сплава CoFeMnNi	75
Осипова В.В. Влияние термомеханической обработки с пластической деформацией при 900°C на особенности микроструктуры ферритно-мартенситной стали ЭК-181	77
Пасько В.Д. Изменение структурно-фазового состояния и микротвердости прекурсоров порошковой смеси 3Ti-1.15Al в зависимости от продолжительности механической активации	79

Пахолкина С.А., Большевич Е.А., Рыжакова В.Г. Особенности структуры биосовместимого пористого материала на основе никелида титана с добавкой Ti и Ni	81
Пестерев Е.А. Закономерности формирования Mo-Zr и W-Zr поверхностных сплавов методом электронно-пучкового синтеза	83
Петраков В.А. Компьютерное моделирование начальных стадий роста карбида кремния на кремнии из монометилсилана	85
Петрухин М.В., Кудряшов Б.С., Резванова А.Е. Дифрактометрические исследования керамики на основе гидроксипатита	87
Пидченко М.Б. AB initio расчеты энергий адсорбции атома кремния на крае и в изломах моноатомной ступени на поверхности Si(100)	89
Плотников Н.В. Исследование влияния Fe+ на чувствительность пленок α -Ga ₂ O ₃ и ϵ -Ga ₂ O ₃ к H ₂	91
Подзывалов С.Н., Слюнько Е.С., Лысенко А.Б. Свойства фотодетекторов на гетероструктурах Ga ₂ O ₃ /ZnGeP ₂	93
Поляков С.В. Исследование зависимости структурной деформации рельсы от различных условий	95
Пономарев С.А. Фазовый переход с температурным гистерезисом в пленках In ₂ Se ₃ /Si(111)	97
Рыжакова В.Г., Большевич Е.А., Пахолкина С.А. Исследование параметров коррозионной стойкости сплавов на основе никелида титана	99
Сапеевская Т.А. Влияние примесей и структурных дефектов на квантовую емкость и термоэдс однослойного графена	101
Сараева А.А. Обратимое ГЦК-ГПУ мартенситное превращение и эффект памяти формы в монокристаллах высокоэнтропийного сплава Cr ₂₀ Mn ₂₀ Fe ₂₀ Co ₃₇ Ni ₃	103
Селиванов Г.Д. Учёт механизма зарождения межзеренных трещин в многоуровневой модели неупругого деформирования алюминия	105
Симонян Р.А., Мостепан П.В., Мурашкин В.В. Встречное взаимодействие световых волн в кристалле силиката висмута среза (111)	107

Слюнько Е.С., Подзывалов С.Н., Габдрахманов А.Ш. Зависимость лучевой прочности дифосфида цинка-германия от постростовых обработок.....	109
Сырых И.С. Моделирование свойств биморфа на основе бидоменного монокристалла ниобата лития	111
Тамошкин М.А. Численное моделирование начальной стадии формирования нитевидных нанокристаллов методом селективной эпитаксии.....	113
Толстихин В.И. Микроструктура и микротвердость сплава V-W-Cr-Zr в зависимости от степени деформации при кручении на наковальнях Бриджмена.....	115
Тохметова А.Б., Курлевская И.Д. Исследование мартенситных превращений под нагрузкой в сплавах с памятью формы на основе NiFeGa(B).....	117
Фаткуллин И.Д., Жердева М.В. Влияние легирования железом на циклическую стабильность сверхэластичности в монокристаллах сплава $\text{Co}_{35}\text{Ni}_{35}\text{Al}_{28}\text{Fe}_2$	119
Хабибова Е.Д. Применение высокодозовой ионной имплантации для повышения коррозионных свойств стали ВНС-5	121
Хайруллин Ф.Н., Ивасенко В.А., Кореньков И.Н. Исследование распределения ионов меди по объему диффузионно-легированного кристалла ниобата лития.....	123
Чепелев Д.В., Лобань В.В. Механические свойства образцов сплава TiNi до и после двухсторонних ионно- и электронно-пучковых обработок поверхности	125
Шаринова Д.К. Плазмонные краски на основе островковых пленок алюминия и других металлов.....	127
Южакова С.И. Анализ тонкой структуры поверхностных Ti-Ni-Ta сплавов, сформированных на подложках из TiNi и ВТ6 электронно-пучковым методом.....	128
Янушоните Э.И., Курлевская И.Д. Циклическая стабильность обратимой деформации в состаренных под нагрузкой в мартенсите монокристаллах CoNiAl	130

НАНОЧАСТИЦЫ МНОГОКОМПОНЕНТНОГО ОКСИДА (FeNiCoCrCu) x O y , ПОЛУЧЕННЫЕ СОВМЕСТНЫМ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ВЗРЫВОМ ПРОВОЛОК РАЗЛИЧНЫХ МЕТАЛЛОВ/СПЛАВОВ

Г.О. Агафонов^{1,2}, К.В. Сулиз^{1,2}

¹Национальный исследовательский

Томский государственный университет, Томск

²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

E-mail: gagafonov@hotmail.com

Высокоэнтропийные (многокомпонентные) оксиды (ВЭО) представляют собой новый класс функциональной керамики, способной удовлетворить рост потребности в новых материалах. Интерес к получению ВЭО обусловлен возможностью получения материалов с новыми или улучшенными функциональными свойствами [1].

Электрический взрыв проволок (ЭВП) является эффективным методом получения порошков на основе широкого спектра наночастиц. Ранее было показано, что совместного ЭВП могут быть получены наночастицы многокомпонентных сплавов [2]. Целью данной работы являлось определение возможности совместного ЭВП различных металлов/сплавов для получения порошков ВЭО. В качестве объекта исследования был выбран состав, содержащий следующие металлы: Fe, Ni, Co, Cr, Cu. Выбор указанных металлов обусловлен возможностью получения однофазной структуры ВЭО по типу шпинели.

Для получения частиц с указанным составом использовались проволоки сплавов 29 НК, Х15Н60 и меди. Взрыв проволок осуществлялся в кислородсодержащей атмосфере (буферный газ – Ar + 20 % об. O₂). В качестве варьируемого параметра условий получения частиц выступала энергия, вводимая в проволоки ($E/\Sigma E_c$ – где E , энергия вводимая в проволоки, ΣE_c – суммарная энергия сублимации проволок). Варьирование E достигалось за счет изменения параметров разрядного RLC-контура (емкости накопителя энергии (C), зарядного напряжения (U_0)) и уменьшения длины проволоки при неизменных параметрах C и U_0 .

Данные рентгенофазового анализа (РФА) показывают, что полученные образцы ВЭО содержат две кристаллические структуры с пространственными группами Fd3m и Fm3m (рис. 1). Кристаллическая структура с пространственной группой Fd3m характерна для ВЭО со структурой шпинели, тогда как кристаллическая структура с пространственной группой Fm3m характерна для оксида никеля (NiO). Из данных РФА следует, что с увеличением $E/\Sigma E_c$ объемное содержание фазы, характерной для NiO увеличивается.

Полученные результаты показывают, что совместный ЭВП различных металлов/сплавов может быть использован для получения порошков на основе ВЭО.

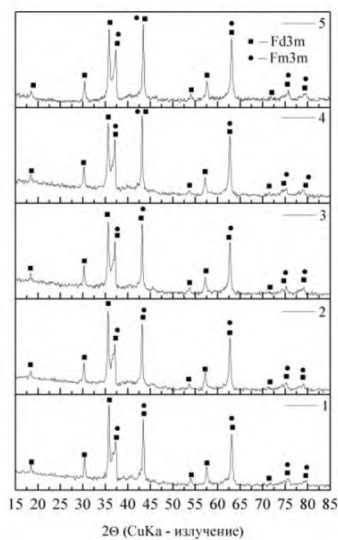


Рис. 1. Данные рентгенофазового анализа образцов наночастиц ВЭО, полученных при различных значениях $E/\Sigma E_c$: 1 – 1.25; 2 – 1.42; 3 – 1.60; 4 – 1.90; 5 – 2.40

Результаты получены с использованием оборудования ЦКП ИФПМ СО РАН «НАНОТЕХ». Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ в рамках научного проекта № 24-29-00638.

Литература

1. Zhang L., Jia J., Yan J. Challenges and Strategies for Synthesizing High Performance Micro and Nanoscale High Entropy Oxide Materials // Small. – 2024. – P. 2309586.
2. Сулиз К.В., Сдобняков Н.Ю., Первиков А.В. Структурно-фазовые состояния наночастиц CoMoFeNiCu, полученных совместным электрическим взрывом проволок // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2023. – № 15. – С. 861–868.

МИКРОСТРУКТУРА, ФАЗОВЫЙ СОСТАВ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СПЛАВОВ CoCrFeMnNi И CoCrNi

Д.О. Астапов^{1,2}

¹*Национальный исследовательский*

Томский государственный университет, Томск

²*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

E-mail: denis.0612@mail.ru

Многокомпонентные системы привлекают к себе большое внимание по многим причинам. В частности, многокомпонентные сплавы с ГЦК-кристаллической решеткой популярны благодаря вязкому характеру разрушения даже при чрезвычайно низких температурах эксплуатации [1]. На основе оригинального подхода к проектированию таких материалов был разработан эквиатомный сплав CoCrFeMnNi, и позже на его основе было создано множество других пяти-, четырех- и трехкомпонентных сплавов [1]. Среди тройных систем наилучшую термодинамическую стабильность продемонстрировал сплав CoCrNi [1]. Однако ввиду недолгой истории развития многокомпонентных систем и, в частности, сплава CoCrNi, все еще недостаточно комплексных исследований, рассматривающих их микроструктуру, фазовый состав, механические свойства, механизмы деформации и разрушения.

В настоящей работе были изучены микроструктура, фазовый состав, механические свойства, механизмы деформации и разрушения многокомпонентных сплавов CoCrFeMnNi и CoCrNi в интервале температур 77–297 К. Для исследования были выбраны сплавы эквиатомного состава Co₂₀Cr₂₀Fe₂₀Mn₂₀Ni₂₀ (сплав Кантора) и Co_{33,4}Cr_{33,3}Ni_{33,3}. Образцы сплавов были подвергнуты термомеханической обработке: отжигу при температуре 1200°C в течение 2 ч, холодной прокатке до 80 % и повторному отжигу при 1200°C в течение 2 ч для сплава Кантора; холодной прокатке до 80 % и отжигу при температуре 1150°C в течение 1 ч с последующей закалкой в воду для трехкомпонентного сплава. Исследования проведены с использованием методов сканирующей (СЭМ) и просвечивающей (ПЭМ) электронной микроскопии, рентгеноструктурного анализа (РСА) и одноосного статического растяжения.

Методом СЭМ показано, что изучаемые сплавы обладают разориентированной крупнозернистой структурой. Средний размер зерна у сплава CoCrFeMnNi составляет 215 мкм, а у сплава CoCrNi – 57 мкм. Оба сплава обладают однофазной структурой с ГЦК-кристаллической решеткой. Благодаря присутствию Fe и Mn в составе пятикомпонентного ВЭС, его параметр решетки $a = 3,598 \text{ \AA}$ оказывается больше, чем у сплава CoCrNi ($a = 3,563 \text{ \AA}$).

Установлена температурная зависимость механических свойств исследуемых сплавов. С понижением температуры испытания предел текучести $\sigma_{0,2}$ и предел прочности σ_B обоих сплавов увеличивается. Максимальные значения $\sigma_{0,2}$ и σ_B наблюдаются в сплаве CoCrNi: соответственно 501 МПа и 1115 МПа при $T = 77$ К (при комнатной температуре $\sigma_{0,2} = 266$ МПа и $\sigma_B = 727$ МПа). У сплава CoCrFeMnNi механические свойства при криогенной и комнатной температурах испытания оказываются ниже ($\sigma_{0,2} = 385$ МПа и $\sigma_B = 947$ МПа при $T = 77$ К; $\sigma_{0,2} = 179$ МПа и $\sigma_B = 521$ МПа при $T = 297$ К), однако при температуре жидкого азота он обладает высокими значениями удлинения до разрушения $\delta = 97$ % (63 % при комнатной температуре). Для сплава CoCrNi $\delta = 83$ % при 77 К и $\delta = 91$ % при 297 К.

Механические свойства сплавов определяются их механизмами деформации. Методом ПЭМ показано, что при $T = 297$ К основным механизмом деформации пятикомпонентного сплава является дислокационное скольжение. Отсутствие Mn и Ni в составе сплава CoCrNi значительным образом не меняет его механизм деформации. Плотность дислокаций в разрушенных образцах обоих сплавов высока ($\rho = 10^{14} - 10^{15} \text{ м}^{-2}$). Наряду с дислокационным скольжением при $T = 77$ К в обоих сплавах происходит активация механического двойникования: на светлопольных ПЭМ-изображения видны двойниковые ламели, а на микродифракционных картинах – дополнительные точечные рефлексы. Несмотря на схожие механизмы деформации, дополнительное упрочнение в сплаве CoCrNi по сравнению со сплавом Кантора происходит за счет более мелкого зерна (зернограницного упрочнения).

Результаты анализа СЭМ-изображений поверхностей разрушения образцов демонстрируют, что при комнатной температуре и при $T = 77$ К оба сплава разрушаются транскристаллитно вязко с образованием многочисленных ямок излома.

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда № 20-19-00261 <https://rscf.ru/project/20-19-00261/>. Исследования выполнены на оборудовании ЦКП «Нанотех» ИФПМ СО РАН. Автор выражает благодарность Астафуровой Е.Г. и Реуновой К.А. за помощь в исследовательской работе.

Литература

1. Moravcik I., Homik V., Minarik P. [et al.] Interstitial doping enhances the strength-ductility synergy in a CoCrNi medium entropy alloy // Materials Science and Engineering. – 2020. – Vol. 781. – Art. № 139242.

ИССЛЕДОВАНИЕ ДЕФЕКТНОЙ СТРУКТУРЫ КОНЦЕНТРИРОВАННЫХ ТВЁРДЫХ РАСТВОРОВ Ni–Fe–Cr ПОСЛЕ ИОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ

О.А. Березиков

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: oberezikov7@gmail.com

Однофазные концентрированные твёрдые растворы (КТР) представляют собой сплав нескольких химических элементов, концентрация которых составляет десятки процентов. Не смотря на наличие лишь одной фазы, они демонстрируют высокую степень радиационной стойкости. Механизмы, реализующие проявление этого свойства, до сих пор слабо изучены, поэтому КТР вызывают научный интерес и, в силу простоты своей структуры, являются удобными объектами для исследования механизмов радиационной стойкости.

Поскольку радиационная стойкость проявляется в подавлении развития и объединения радиационных дефектов, генерируемых каскадами атомных смещений, то для выявления механизмов, реализующих высокую радиационную стойкость у КТР необходимо рассматривать процессы на атомном уровне. Поэтому в данной работе с помощью метода молекулярной динамики исследовалась дефектная структура 19 составов КТР на основе Ni с ГЦК решеткой и чистый никель для сравнения после ионного облучения. Составы КТР принимали вид $Ni_{100-x-y}Fe_xCr_y$, где x и y принимали значения 0, 10, 20, 33, 40 и 50 %. Для каждого состава моделировалось 20 отдельных каскадов. Длительность расчета каждого каскада составляла 20 пс. Энергия первично выбитого атома составляла 20 кэВ, температура образцов – 900 К. Использовался потенциал взаимодействия, рассчитанный в рамках метода погруженного атома [1].

Результаты моделирования показали, что добавление новых элементов к чистому никелю приводит к сокращению количества «выживших» пар Френкеля после затухания каскада. Однако Cr и Fe влияют на этот параметр в разной степени. Так, например, при концентрации Cr около 40 %, количество «выживших» пар Френкеля не опускается ниже 40, когда как при 10 % Cr, это количество принимает значения более 40 для чистого никеля и около 35 для состава с 30 % Fe, при больших концентрациях Fe снова наблюдается небольшой рост. Также это количество для всех составов с концентрацией Ni более 75 % тоже не опускалось ниже 40. На тройных диаграммах зависимости количества «выживших» пар Френкеля от концентраций химических элементов при этом наблюдается неоднород-

ный градиент как относительно изменения концентрации Ni, так и относительно Cr и Fe.

Процент как собственных межузельных атомов (СМА), так и вакансий, входящих в состав кластеров, также снижался с добавлением Fe и Cr к чистому Ni. При концентрации Fe менее 25 % наблюдается увеличение степени кластеризации СМА с ростом концентрации Ni. Максимальный рост составлял от 55 % до 80 %. Наоборот, при концентрации Fe более 25 %, степень кластеризации СМА практически не меняется, и колеблется около 65 %. Кластеризация же вакансий увеличивается с ростом концентрации преимущественно Fe. Когда как Cr, в свою очередь, не оказывает значительного влияния на степень кластеризации вакансий.

Распределения кластеров по их размерам после развития каскада показывают, что в чистом никеле резко возрастает количество кластеров из СМА с размером более 21 точечного дефекта, когда как в составах, близких к $\text{Ni}_{60}\text{Fe}_{20}\text{Cr}_{20}$, наоборот, большое количество кластеров, размером до 11 точечных дефектов. Количество кластеров с размерами в промежутке от 11 до 21 дефекта для большинства составов не сильно различается. В случае вакансий, в силу их низкой подвижности, по сравнению с СМА, на рассматриваемых временах распределения оказались более или менее однородными. Можно выделить составы с концентрацией никеля от 50 до 75 %, где слегка завышено количество кластеров с размером от 2 до 11 и занижено с размерами более 21 точечных дефектов.

Неоднородность такой характеристики, как количество «выживших» точечных дефектов после каскада, говорит о том, что она зависит не только от химической неупорядоченности, но и от того, из каких именно химических элементов состоит сплав. Показано, что степень кластеризации СМА выше, чем у вакансий, особенно при образовании маленьких кластеров. Скорее всего это связано с более высокой подвижностью СМА.

Автор выражает благодарность научному руководителю Корчуганову А.В. за организацию исследовательской работы и обсуждение полученных результатов.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации № МК-5189.2022.1.2.

Литература

1. Accurate classical short-range forces for the study of collision cascades in Fe-Ni-Cr / L.K. Béland, A. Tamm, S. Mu [et al.] // Computer Physics Communications. – 2017. – Vol. 219. – P. 11–19.

РАЗРАБОТКА МЕТОДА СИНТЕЗА ЭЛЕКТРОКАТАЛИТИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ КАРБИДА КРЕМНИЯ

С.А. Битенко, А. Насырбаев, А.И. Циммерман

*Национальный исследовательский
Томский политехнический университет, Томск*

E-mail: sab51@tpu.ru

Карбид кремния (SiC) известен науке как материал, который обладает множеством полезных свойств и значительным прикладным потенциалом [1]. Нано-SiC, благодаря большой площади поверхности, может использоваться в качестве вспомогательного материала для электрокаталитических реакций [2]. Одной из фундаментальных научных задач является разработка новых методик получения наноструктур карбида кремния, в том числе с использованием такого прекурсора как биомасса. В настоящей работе предлагается осуществлять синтез нанодисперсного карбида кремния путем плазмодинамического синтеза.

В качестве исходного материала использовалась рисовая шелуха, которая подвергалась окислительной карбонизации, после чего ее смешивали с углеродом и использовали в качестве прекурсора в процессе синтеза. Полученная смесь помещается в канал формирования плазменной структуры коаксиального магнетоплазменного ускорителя с графитовыми электродами. При электропитании ускорителя происходит формирование дугового разряда с сопутствующей возгонкой исходной смеси до жидкофазного состояния. Полученная плазменная структура ускоряется, и в головном скачке уплотнения реализуются необходимые экстремальные условия. Синтезированный материал формируется в виде нанодисперсного порошка. Такой порошок содержит карбид кремния с кристаллической структурой гексагональной фазы с возможностью появления кубической фазы. На рис. 1 представлены микроснимки синтезированного порошка, по которым идентифицируются частицы с наноразмерной структурой и не обнаружены частицы микронных размеров.

После плазмодинамического синтеза производили исследования электрокаталитических свойств методом трехэлектродной ячейки. Производилось сравнение таких характеристик, как перенапряжение и наклон Тафеля. Синтезированные порошки были модифицированы платиной методом мокрой пропитки.

В таблице приведены результаты испытаний полученных материалов в качестве электрокатализаторов. В сравнении с коммерческим материалом на основе платины (Pt/C, Hispec 3000), продукт синтеза в чистом виде отличается невысокой каталитической активностью, судя по величине

η_{10} , однако даже после добавления малого количества платины (5 %) становится сравним по своим характеристикам с коммерческим образцом.

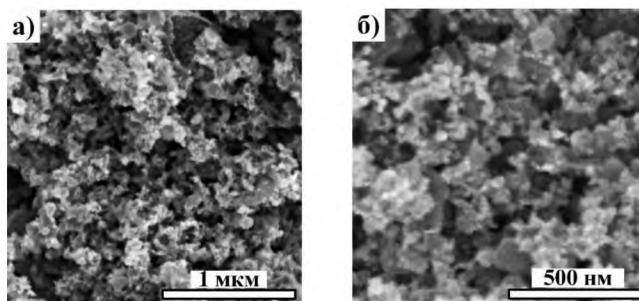


Рис. 1. Результаты сканирующей электронной микроскопии продуктов плазмодинамического синтеза

Результаты испытаний каталитической активности

Образец	ΔT_1 , мВ	ΔT_{10} , мВ	ΔT_{100} , мВ	b , мВ/дек
SiC	351 ± 26	494 ± 14	652 ± 31	125 ± 30
5Pt/SiC	-	24 ± 4	93 ± 5	34 ± 2
Pt/C (Hispec 3000)	-	21 ± 3	118 ± 5	30 ± 2

В результате проведенных исследований получен наноразмерный продукт, содержащий карбид кремния, путем последовательных карбонизаций и плазмодинамического синтеза из рисовой шелухи. Продукт при модификации 5 % платины способен проявлять электрокаталитическую активность, сравнимую с коммерческим образцом.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда No 21-73-10245, <https://rscf.ru/project/21-73-10245/>

Литература

1. Papanasam E., Prashanth Kumar B., Chanthini B., Manikandan E., Agarwal L. A comprehensive review of recent progress, prospect and challenges of silicon carbide and its applications // *Silicon*. – 2022. – Vol. 14. – P. 12887–12900.
2. Wang Y., Dong S., Li X., Hong C., Zhang X. Synthesis, properties, and multifarious applications of SiC nanoparticles: A review // *Ceramics International*. – 2022. – Vol. 48. – P. 8882–8913.

КОРРОЗИОННАЯ СТОЙКОСТЬ БИОСОВМЕСТИМЫХ ПОРИСТО-МОНОЛИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ НИКЕЛИДА ТИТАНА В БИОЛОГИЧЕСКОЙ СРЕДЕ

Е.А. Большевич, С.А. Пахолкина, В.Г. Рыжакова

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: bolshevich-elena@mail.tsu.ru

Пористо-монокристаллические материалы на основе никелида титана (TiNi) являются перспективными имплантационными материалами, совмещающими в себе улучшенные физико-механические свойства и повышенную интеграционную способность при взаимодействии с мягкими тканями и твердыми костными структурами [1].

Коррозионная стойкость является одним из важнейших требований, предъявляемым к медицинским изделиям, так как именно она определяет срок службы материала [2]. Поэтому целью работы является исследование коррозионных параметров нового композитного материала на основе TiNi в физиологическом растворе.

В качестве исследуемого материала использовались композитные образцы, состоящие из монокристаллической пластины TiNi с пористой порошковой поверхностью, полученной диффузионным спеканием. Поверхность представляла собой порошковую смесь А–Б, где смесь А (5 % Ti + 0,5 % Ni + TiNi), экзотермическая добавка Б (Ti + Ni) в различных соотношениях: TiNi (1–1), TiNi (1–0,75), TiNi (1–0,5). Также для выполнения сравнительного анализа использовался дополнительный образец на основе Ti.

Спекание проводилось при температуре 1100 градусов и выдержке 15 минут в электровакуумной печи СНВЭ-1,31/16-И4. Для гомогенизации поверхности исследуемые образцы подвергались обработке электронным пучком на станции РИТМСР (ООО «Микросплав», Томск, Россия).

Для оценки коррозионных характеристик использовали метод вольт-амперометрии с линейной разверткой потенциала. Электрохимические измерения проводились в физиологическом растворе (0,9 % NaCl), при температуре 25°C в трехэлектродной ячейке с помощью потенциостат-гальваностата Р-40Х (Electrochemical Instruments, Черногловка – 2017). Потенциодинамические кривые регистрировались при изменении потенциала от –1 до +1 В со скоростью изменения развертки 3 мВ/с.

Методом экстраполяции Тафеля были получены значения тока коррозии и потенциала коррозии. Скорость коррозии рассчитывалась с учетом шероховатости поверхности по формуле, приведенной в стандарте ASTM G102.

По данным, полученным из электрохимических исследований, установлено, что на скорость коррозии влияет количество экзотермической добавки. Наиболее низкая скорость коррозии наблюдается у TiNi с ее наибольшим содержанием: значение скорости коррозии образца TiNi (1–1) примерно в 2,5 раза меньше по сравнению с TiNi (1–0,5). Причиной этого является уменьшение удельной поверхности материала с увеличением количества экзотермической добавки. Все исследуемые композитные образцы имеют скорость коррозии ниже, чем у Ti, что подтверждает перспективность данных материалов для медицинского применения.

Микроскопический анализ показал наличие локальных разрушений на поверхности материала после электрохимических испытаний: трещин, питтингов. Преимущественно коррозии подвергаются пористые участки материала, поэтому происходит увеличение скорости коррозии с уменьшением количества экзотермической добавки.

Таким образом, в результате выполненной работы показано, что увеличение доли экзотермической добавки приводит к увеличению параметров коррозионной устойчивости пористо-монолитных материалов на основе TiNi.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 19-79-10045.

Литература

1. Гюнтер В.Э. Медицинские материалы и имплантаты с памятью формы: в 14 томах / В.Э. Гюнтер, В.Н. Ходоренко, Т.Л. Чекалкин и др.; под ред. В.Э. Гюнтера. – Томск: Изд-во «МИЦ», 2011. – Т. 1. – 534 с.
2. Manivasagam J. Biomedical Implants: Corrosion and its Prevention - A Review / J. Manivasagam, D. Dhinasekaran, A. Rajamanickam // Recent Patents on Corrosion Science. – 2010. – Vol. 2. – P. 40–54.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОКРЫТИЙ СИСТЕМЫ TiAlTaSiN ПРИ ВАРЬИРОВАНИИ КОНЦЕНТРАЦИИ КОМПОНЕНТОВ

А.С. Волобуев

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: shura.volobuev.2002@mail.ru

В современном мире экономические потери, а также риски, вызванные износом механических компонентов, достаточно велики. Сохранение эксплуатационных свойств деталей в течение длительного срока – важная инженерная задача. Она может быть осуществлена нанесением на детали износостойких покрытий, приводящих к повышению их срока службы.

Одним из широко используемых покрытий в промышленности является TiAlN, обладающий высокой твердостью и износостойкостью, термической стабильностью и стойкостью к окислению. Однако трещиностойкость данных покрытий не велика вследствие наличия выраженного ионного характера связи между Al и N. Добавление Ta в такие покрытия позволяет сохранить высокую твердость при повышенных температурах, однако ее величина в сравнении с TiAlN снижается [1]. К тому же с повышением содержания Ta в TiAlTaSiN формируются крупные столбчатые зерна с прямыми ровными границами [1], способствующие быстрому распространению внутрь покрытия трещин при циклических нагрузках.

Сохранение необходимых эксплуатационных свойств может быть осуществлено созданием в покрытиях на основе TiAlN нанокристаллической структуры, для получения которой может быть использовано легирование Si [2]. При этом большая часть Si сегрегируется по границам зерен, образуя в покрытии зернограницные аморфные фазы, что приводит к существенному уменьшению размера зерен в материале (до 10 нм и меньше) и сопровождается значительным повышением твердости (до 50–80 ГПа [3]). В то же время добиться существенного повышения трещиностойкости и износостойкости покрытий TiAlN путем их легирования кремнием не удастся.

Таким образом, перспективное направление улучшения свойств покрытий на основе TiAlN заключается в одновременном введении тантала и кремния, что позволит создавать покрытия, обладающие рядом преимуществ, характерных как для TiAlTaSiN, так и для TiAlSiN.

Подбор оптимального химического состава может быть наряду с экспериментальными исследованиями эффективно осуществлен методами компьютерного моделирования. Использование метода молекулярной

динамики позволяет предсказать свойства материала в зависимости от структуры и концентрации компонентов. Таким образом, целью данного исследования является оценка влияния концентрации компонентов на механические характеристики покрытий.

В настоящей работе с использованием метода молекулярной динамики исследовался отклик монокристалла TiAlTaSiN на внешнее механическое воздействие. Были проведены следующие механические испытания: одноосное растяжение, наноиндентирование и скретч-тестирование. Каждое испытание осуществлялось вдоль трех основных кристаллографических направлений ($[100]$, $[110]$, $[111]$), а также для трех концентраций Si (2.5 %, 5 %, 6.25 %).

На основе результатов моделирования были получены диаграммы растяжения. Их анализ позволил получить значения пределов прочности, лежащие в диапазоне 12.8 – 29.4 ГПа. Построены кривые вдавливания при наноиндентировании, а также кривые сопротивления движению индентора при скретч-тестировании.

Выявлено, что увеличение концентрации Si для кристаллографического направления $[100]$ ведет к увеличению предела прочности, а для направления $[111]$ – к снижению. В то же время для кристаллографического направления $[110]$ закономерностей не выявлено. Также при росте концентрации Si происходит увеличение силы сопротивления покрытия при скретч-тестировании. Это, в конечном счете, может приводить к увеличению показателей сохраняемости и долговечности деталей, с нанесенными на них покрытиями TiAlTaSiN .

Литература

1. Shugurov A.R., Kuzminov E.D., Kasterov A.M., Panin A.V., Dmitriev A.I. Tuning of mechanical properties of $\text{Ti}_{1-x}\text{Al}_x\text{N}$ coatings through Ta alloying // *Surf. Coat. Technol.* – 2020. – Vol. 382. – 125219.
2. Chen M., Cai F., Chen W., Wang Q., Zhang S. Influence of vacuum annealing on structures and properties of Al-Ti-Si-N coatings with corrosion resistance // *Surf. Coat. Technol.* – 2017. – Vol. 312. – P. 25–31.
3. Veprek S. Recent search for new superhard materials: Go nano! // *J. Vac. Sci Technol. A.* – 2013. – Vol. 31. – P. 050822-1-33.

ИЗМЕНЕНИЕ ХАРАКТЕРА ОСЦИЛЛЯЦИЙ КАРТИН ДБОЭ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ ПРИ СИНТЕЗЕ Si НА Si(100)

О.И. Ворсин, О.И. Кукунов

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: janekroll2018@gmail.com

Кремний-германиевые наноструктуры находят своё широкое применение в области нанoeлектроники и нанoфотоники. Параметры наноструктур зависят от условий их синтеза, таких как: температура, скорость роста, уровень вакуума и др. С целью избавления от влияния дефектов подложки на образование наноструктур, как правило наносится буферный слой. Но даже после этой процедуры, на поверхности всё ещё неизбежно остаются атомные ступени из-за отклонения среза подложки от основной кристаллической плоскости [1]. Целью работы является определение влияния температуры на механизмы формирования террас при эпитаксиальном росте Si на Si(100) методом дифракции быстрых отражённых электронов.

Эксперименты проводились на установке молекулярно-лучевой эпитаксии «Катунь-100» в условиях сверхвысокого вакуума (10^{-10} торр) при температурах роста от 200°C до 800°C. После стандартной предэпитаксиальной очистки и нанесения 50 нм буферного слоя Si, происходил синтез Si на Si(100) со скоростью 0,1 МС/с. Морфология поверхности контролировалась методом дифракции быстрых отражённых электронов в течение всего эксперимента в направлении [110] падения пучка электронов на Si(100).

В результате исследований гомоэпитаксиального роста Si/Si(100) методом ДБОЭ обнаружена зависимость характера осцилляций интенсивности картин дифракции во времени от температуры подложки, а именно получена зависимость отношения периодов формирования террас одного вида к периодам другого от температуры.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ в рамках научного проекта 23-62-10021.

Литература

1. Kukenov O.I., Sokolov A.S., Dirko V.V. et al. Analysis of the temperature dependence of homoepitaxial growth of Si on Si by reflection high-energy electron diffraction // St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. – 2023. – Vol. 16, № 3.1. – P. 112–116.

ОРИЕНТАЦИОННАЯ ЗАВИСИМОСТЬ МЕХАНИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ CrMnFeCoNi ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ СПЛАВОВ ПРИ РАСТЯЖЕНИИ

А.В. Выродова

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: wirodowa@mail.ru

Высокоэнтропийные сплавы (ВЭС) – это класс металлических соединений, в котором за счет смешивания пяти и более элементов в равных атомных пропорциях достигается значительный эффект твердорастворного и деформационного упрочнения. К настоящему времени наиболее полно изученным ВЭС с ГЦК решеткой является однофазный эквиатомный сплав Кантора $\text{Co}_{20}\text{Cr}_{20}\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{20}\text{Mn}_{20}$, который обладает сочетанием высокой прочности и хорошей пластичности и вязким характером разрушения вплоть до криогенных температур испытания [1]. На основе эквиатомного сплава $\text{Cr}_{20}\text{Mn}_{20}\text{Fe}_{20}\text{Co}_{20}\text{Ni}_{20}$ разработаны новые неэквиатомные сплавы, такие как $\text{Cr}_{20}\text{Mn}_{20}\text{Fe}_{20}\text{Co}_{40-x}\text{Ni}_x$ ($X = 0, 3, 5, 10$) ат. %, в которых ГЦК-ГПУ мартенситное превращение (МП) является обратимым и реализуется эффект памяти формы (ЭПФ) [2].

В настоящей работе на $[\bar{1}11]$ - и $[\bar{1}44]$ - кристаллах ГЦК $\text{Cr}_{20}\text{Mn}_{20}\text{Fe}_{20}\text{Co}_{20}\text{Ni}_{20}$ (I) с $\gamma_0 = 0.18\text{--}0.20$ Дж/м² и $\text{Cr}_{20}\text{Mn}_{20}\text{Fe}_{20}\text{Co}_{33}\text{Ni}_7$ (II) ВЭС $\gamma_0 = 0.14$ Дж/м² представлены исследования температурной зависимости напряжений на пределе текучести $\sigma_{0.1}(T)$, механизма деформации, кривых течения и пластичности при деформации растяжением в температурном интервале от 77 до 573 К.

Монокристаллы ВЭС (I) и (II) были получены методом Бриджмена. Химический состав монокристаллов определяли рентгенофлуоресцентным методом: для $\text{Cr}_{20}\text{Mn}_{20}\text{Fe}_{20}\text{Co}_{20}\text{Ni}_{20}$: Cr = 19.66, Mn = 20.89, Fe = 20.41, Co = 20.09, Ni = 18.95 (ат. %); для $\text{Cr}_{20}\text{Mn}_{20}\text{Fe}_{20}\text{Co}_{33}\text{Ni}_7$: Cr = 20.49; Mn = 20.91; Fe = 19.52; Co = 32.07; Ni = 7.01 (ат. %). Механические испытания и ЭПФ в условиях изотермической деформации проводили на испытательной машине Instron 5969 со скоростью деформации $4 \cdot 10^{-4}$ с⁻¹.

Показано, что в монокристаллах ВЭС (I) температурная зависимость $\sigma_{0.1}(T)$, деформационное упрочнение и пластичность определяются скольжением и двойникованием. Температурная зависимость $\sigma_{0.1}(T)$ имеет вид, типичный для ГЦК сплавов при деформации скольжением. При 296 К в исследованных кристаллах основным механизмом деформации является скольжение. Двойникование в одной системе обнаружено после деформации 5 и 60 % в $[\bar{1}11]$ - и $[\bar{1}44]$ - кристаллах, соответственно.

При 77 К основным механизмом деформации в данных кристаллах является двойникование в нескольких системах. В $[\bar{1}11]$ - и $[\bar{1}44]$ - кристаллах максимальный коэффициент деформационного упрочнения $\theta = d\sigma/d\varepsilon = 2\,940$ и $2\,500$ МПа, соответственно, достигается при 77 К, когда развивается множественное двойникование. Максимальная пластичность $\delta = 58$ и 104% в $[\bar{1}11]$ - и $[\bar{1}44]$ - кристаллах, соответственно, имеет место при 296 К, когда двойникование развивается в одной системе.

В монокристаллах ВЭС (II) температурная зависимость $\sigma_{0.1}(T)$, деформационное упрочнение и пластичность определяются тремя механизмами деформации: ГЦК-ГПУ МП, двойникованием и скольжением. Это подтверждается исследованиями температурной зависимости $\sigma_{0.1}(T)$, которая имеет вид, характерный для сплавов, испытывающих МП под нагрузкой. При 77К в $[\bar{1}11]$ - кристаллах ГЦК-ГПУ МП развивается одновременно в нескольких системах с начала деформации и обеспечивает $\theta = 4576$ МПа и $\delta = 17\%$. При 300 К в $[\bar{1}11]$ - кристаллах ВЭС (II) двойникование в одной системе развивается более интенсивно, чем в ВЭС (I), что обусловлено меньшим значением γ_0 . Это обеспечивает значения $\theta = 1960$ МПа и $\delta = 44\%$. В $[\bar{1}44]$ - кристаллах при 300 К деформация развивается с низким коэффициентом деформационного упрочнения $\theta=450$ МПа и высокой пластичностью $\delta = 95\%$. Физическая причина высокой пластичности связана с локализацией деформации двойникованием преимущественно в одной системе, которая подавляет условия для образования шейки и смещает их в сторону больших деформаций.

В ВЭС (II) ГЦК-ГПУ МП является обратимым, и проявляется ЭПФ, который зависит от ориентации кристалла. В $[\bar{1}11]$ - и $[\bar{1}44]$ - кристаллах максимальный ЭПФ при изотермической деформации равен 5.3 и 11.03%, соответственно, а при изобарической 1.57 и 9.27 %, соответственно.

Автор выражает благодарность своим руководителям гл.н.с. И.В. Киреевой и проф. Ю.И. Чумлякову за помощь в эксперименте и в обсуждении полученных результатов. Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 22-19-00016.

Литература

1. Otto F. et al. The influences of temperature and microstructure on the tensile properties of a CoCrFeMnNi high-entropy alloy // Acta Mater. – 2013. – Vol. 61. – P. 5743–5755.
2. Lee J.I. et al. A strategy of designing high-entropy alloys with high-temperature shape memory effect // Sci. Rep. – 2019. – Vol. 9. – № 13140.

СПЕКТРАЛЬНЫЕ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПАРАМЕТРИЧЕСКИХ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕЙ ЧАСТОТЫ СРЕДНЕГО ИК И ТГЦ ДИАПАЗОНА НА БАЗЕ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ НЕЛИНЕЙНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ГРУППЫ A2B4C5

А.Ш. Габдрахманов, С.Н. Подзывалов, А.Ю. Кальсин

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: realist98937@mail.ru

Повышение мощности и эффективности лазерных систем среднего ИК-диапазона остается одной из основных проблем современной лазерной физики и технологии, что обусловлено потребностью в таких системах при решении множества научных и прикладных задач. К таким задачам относятся: дистанционный газовый анализ и мониторинг атмосферы [1], обработка материалов [2], исследование новых физических эффектов [3], генерация аттосекундных рентгеновских импульсов и ускорение частиц, и многие другие. Цель данной работы заключалась в получении информации о параметрах термолинзы, наводимой в монокристалле ZnGeP_2 при воздействии на него импульсно-периодического излучения накачки высокой мощности. Современные технологии роста монокристаллов ZnGeP_2 и постростовые обработки материала позволяют создавать нелинейные кристаллы с низким коэффициентом поглощения всего $0,02 \text{ см}^{-1}$ на длине волны $2,1 \text{ мкм}$. Это объясняется высокой теплопроводностью монокристалла ZnGeP_2 , которая составляет $0,18 \text{ Вт} \cdot \text{см}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$. Благодаря этому, вероятность нагрева окружающей среды до температур, способных привести к деградации материала, является невысокой.

Общий и/или локальный нагрев кристалла при поглощении излучения накачки или генерации параметрических генераторов света (ПГС) может приводить к термонаведённым изменениям показателя преломления нелинейно-оптического элемента. В частности, возможно формирование термолинзы в кристалле ZnGeP_2 , которая влияет на пространственный профиль пучков накачки и генерации ПГС (фокусируя их с увеличением плотности энергии до критического значения). Другим проявлением локального тепловыделения и нагрева нелинейного элемента является формирование в объёме кристалла механически напряженных областей, служащих источниками свободных электронов.

С использованием разработанной оптической установки мы провели эксперимент по определению наводимой в кристалле термолинзы в процессе генерации параметрического излучения, результаты которого представлены далее. В первую очередь экспериментально были получены

значения пороговой мощности $P_{th}=4,15$ Вт. На рис. 1 показана зависимость выходной мощности ПГС генерации и теплового фокусного расстояния от мощности накачки $ZnGeP_2$.

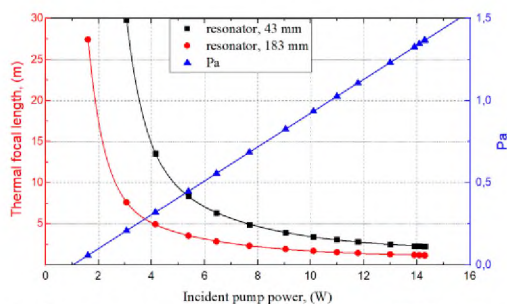


Рис. 1. Зависимость выходной мощности ПГС генерации и теплового фокусного расстояния от мощности накачки $ZnGeP_2$

Полученная зависимость описывается сигмоидальным законом, пороговая мощность накачки, при которой наблюдалась генерация, составила $P_{th} = 4,15$ Вт. При этом, в ходе эксперимента наблюдалось насыщение выходной мощности ПГС генерации, и при мощности накачки $P_p = 14,3$ Вт мощность переставала расти. Мы связываем это с эффектом термолинзы в кристалле. Далее система ПГС была использована для экспериментального определения значений наведенной в кристалле термолинзы.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-10193.

Литература

1. Шигапов А.Б., Ярхамов Ш.Д. К определению размеров дисперсных частиц путём изменения параметров рассеянного излучения // Известия вузов. Авиационная техника. – 2004. – № 4. – С. 58–60.
2. Половченко С.В., Чартий П.В. Восстановление функции распределения частиц по размерам с использованием методов лазерного зондирования // Безопасность в техносфере. – 2014. – Т. 3, № 6. – С. 37–42.
3. Романовский О.А. Методика и результаты поиска информативных длин волн зондирования газовых компонент атмосферы // Прикладная физика. – 2009. – № 1. – С. 24–31.

СВЕРХСТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ НА НАЧАЛЬНЫХ СТАДИЯХ НАПЫЛЕНИЯ Ge/Si(100) В ШИРОКОМ ИНТЕРВАЛЕ ТЕМПЕРАТУР

А.В. Гнеушев, И.Ю. Дюков

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: gneushev2000@mail.ru

Создание полупроводниковых структур с желаемыми физическими свойствами и заданными параметрами является основной задачей нанoeлектроники. Для создания таких наноструктур необходимо иметь представление о процессах, протекающих при их формировании. Целью работы является анализ изменения сверхструктуры на начальных стадиях роста Ge на Si (100) в диапазоне температур 300–800°C.

Метод молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) позволяет получать тонкие эпитаксиальные плёнки с минимальным количеством дефектов и резкой гетерограницей. Исследования проводились на установке МЛЭ «Катунь - 100» в условиях сверхвысокого вакуума. Морфология поверхности контролировалась методом дифракции быстрых отраженных электронов в направлениях [110] и [100] для Si(100). На начальных стадиях напыления Ge наблюдалось возникновение рефлексов 1/N, что соответствует сверхструктуре 2xN [1]. Скорость роста Ge составляла 0,02 МС/с.

В результате исследований получена зависимость толщины слоя Ge до возникновения рефлексов 1/N от температуры (300–800°C). Обнаружено, что при увеличении температуры уменьшается толщина плёнки Ge, при которой возникает рефлекс 1/N. Такая зависимость может говорить о более эффективном снятии упругих напряжений за счёт сверхструктур при высоких температурах по сравнению с низкими. Также получены зависимости изменения интенсивности рефлексов 2x1 и 1x2 от времени для температур 300–800°C. Выявлена критическая точка 550°C, при которой ступени двух разных типов максимально сближаются. Данные исследования перспективны для технологии создания наноструктур для устройств нанofотоники и нанoeлектроники.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ в рамках научного проекта № 23-62-10021.

Литература

1. Dirko V.V. et al. High-resolution RHEED analysis of dynamics of low-temperature superstructure transitions in Ge/Si(001) epitaxial system // Nanotechnology. – 2022. – V. 33, № 11. – P. 115603-1–115603-8.

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ОТЖИГОВ НА МИКРОСТРУКТУРУ И МИКРОТВЕРДОСТЬ СПЛАВА V–Ta–Cr–Zr ПОСЛЕ ДЕФОРМАЦИОННОГО ЭТАПА ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ

Б.В. Гомоля

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: borgomolya@mail.ru

В настоящее время малоактивируемые ванадиевые сплавы рассматриваются в качестве перспективных конструкционных материалов для работы в реакторах деления и синтеза [1, 2]. Одной из актуальных материаловедческих задач является разработка режимов термомеханической обработки ванадиевых сплавов, позволяющих повысить их жаропрочность и жаростойкость с сохранением приемлемого уровня технологической пластичности. Необходимым этапом такой оптимизации является изучение характеристик микроструктуры и механических свойств в зависимости от отжигов в широком температурном интервале.

В настоящей работе проведено исследование влияния температуры отжигов на параметры микроструктуры и микротвердости сплава V–Ta–Cr–Zr после деформационного этапа термомеханической обработки.

В работе использовался сплав V–6,3 Ta–4,1 Cr–1,4 Zr–0,032 C–0,061 O–0,015 N (вес. %) после деформационного этапа термомеханической обработки, которая включает себя гомогенизирующий вакуумный отжиг при 1300°C и несколько циклов «деформация прокаткой ($\epsilon \geq 50\%$) при комнатной температуре и вакуумный отжиг при 950–1000°C». Для изучения термической стабильности образцы подвергались вакуумным часовым отжигам при температурах 700, 800, 900, 1000, 1100, 1200, 1300 и 1400°C.

Карты ориентации зерен получены с помощью сканирующего электронного микроскопа Thermo Fisher Apreo 2 S (20 kV), оснащенного системой регистрации обратно рассеянных электронов EDAX Velocity Super. Микротвердость определялась методом Виккерса на приборе «Neophot 21» при нагрузке 0,5 Н и выдержке 15 секунд. Погрешность измерения составляла не более 5 %.

Выявлены основные этапы протекания процессов релаксации в сплаве V–Ta–Cr–Zr после деформационного этапа термомеханической обработки. Установлено, что отжиги при температурах до 800°C включительно не оказывают влияния на зеренную структуру (которая представлена вытянутыми зернами шириной от 5 до 30 мкм и длиной от 10 до 200 мкм, а

внутри их присутствуют малоугловые разориентации) и значения микротвердости (2,3 ГПа) изучаемого сплава.

Термообработка при 900°C характеризуется началом первичной рекристаллизации, в результате чего происходит образование почти бездефектных зерен на фоне исходной микрополосовой зеренной структуры. Это приводит к снижению субструктурного упрочнения, в результате чего значения микротвердости уменьшаются на 10 % (2,1 ГПа).

Показано, что процессы первичной рекристаллизации завершаются во всем объеме материала при 1000°C, что приводит к исчезновению исходных вытянутых зерен и появлению равноосных зерен размерами 10–30 мкм.

Увеличение температуры отжига в интервале 1100–1300°C сопровождается процессами собирательной рекристаллизации и увеличением средних размеров зерен от 14 до 21 мкм. Температурой начала вторичной рекристаллизации является 1400°C, которая сопровождается появлением крупных зерен (150–180 мкм) на фоне относительно мелких (10–20 мкм). Таким образом, при 1000–1400°C наблюдаются релаксационные процессы, приводящие к снижению субструктурного упрочнения из-за увеличения размера зерен, однако это не приводит к дальнейшим изменениям значений микротвердости (2,0–2,1 ГПа). По нашему мнению, это связано с процессами растворения и перераспределения частиц вторых фаз на основе карбида циркония, которые обеспечивают реализацию дисперсного упрочнения по механизму типа механизма Орована.

Автор выражает благодарность: д.ф.-м.н., профессору Чернову В.М. и Потапенко М.М. (ОАО «ВНИИНМ им. Бочвара», Москва) за предоставленный сплав; научному руководителю: к.т.н., Смирнову И.В. за организацию исследовательской работы и обсуждение полученных результатов. Исследование проведено с использованием оборудования ЦКП ИФПМ СО РАН «NANOTEX».

Литература

1. Chen J.M., Chernov V.M., Kurtz R.J. et al. Overview of the vanadium alloy researches for fusion reactors // J. Nucl. Mater. – 2011. – Vol. 417 – P. 289–294.
2. Гриняев К.В., Дитенберг И.А., Тюменцев А.Н. и др. Влияние условий термомеханической обработки на особенности структурно-фазовых трансформаций и уровень механических свойств ванадиевых сплавов разных систем // Известия вузов. Физика. – 2019. – Т. 62, № 8. – С. 159–165.

ЗАКОНОМЕРНОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ МАРТЕНСИТА В СРЕДНЕЭНТРОПИЙНОМ СПЛАВЕ $\text{Fe}_{40}\text{Mn}_{40}\text{Co}_{10}\text{Cr}_{10}$

Д.Ю. Гуртова^{1,2}

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: dasha_gurtova@mail.ru

Высокоэнтروпийный сплав Кантора FeMnCrNiCo привлекает значительное внимание ученых в последние десятилетия поскольку обладает превосходными физико-механическими характеристиками [1]. Использование этого сплава в качестве конструкционного материала ограничено из-за низких показателей его предела текучести [2]. Одним из способов избавления от данного недостатка является изменение состава сплава или отклонение от эквиатомной композиции, что снижает энергию дефекта упаковки сплава и приводит к активации TWIP и TRIP эффектов, повышая тем самым его прочностные свойства [3]. Кроме того, уменьшение содержания в сплаве Кантора или полное исключение из его состава дорогостоящих компонентов, таких как Co и Ni, очевидно, способствуют снижению стоимости материала.

В представленной работе с использованием методов измерения микротвердости по Виккерсу, сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии проведено исследование факторов, влияющих на прохождение мартенситного превращения, а также роли термомеханических обработок в формировании структуры и фазового состава среднеэнтропийного неэквиатомного сплава $\text{Fe}_{40}\text{Mn}_{40}\text{Co}_{10}\text{Cr}_{10}$. В качестве объекта исследования был выбран сплав $\text{Fe}_{40}\text{Mn}_{40}\text{Co}_{10}\text{Cr}_{10}$ в литом, деформированном и гомогенизированном состояниях. Гомогенизация заготовок происходила путем холодной прокатки до степени обжатия 65 % с последующим отжигом при разных температурах (Т) и продолжительности выдержки (t) с закалкой образцов в воду: режим 1 – Т = 1200 °С, t = 2 ч; режим 2 – Т = 1200 °С, t = 1 ч; режим 3 – Т = 1100 °С, t = 2 ч; режим 4 – Т = 1100 °С, t = 1 ч.

В литом состоянии исследуемый сплав $\text{Fe}_{40}\text{Mn}_{40}\text{Co}_{10}\text{Cr}_{10}$ обладает крупнокристаллической дендритной структурой, представленной двумя фазами – аустенитной (γ -фаза) и термически индуцированной мартенситной (ε -фаза). Методом энергодисперсионной спектроскопии было установлено обеднение дендритных областей заготовок по марганцу (до ≈ 35 ат. %), что способствовало прохождению мартенситного превращения при комнатной температуре.

Деформирование литых заготовок рассматриваемого сплава путем холодной прокатки привело к формированию в результате пластической деформации в них мартенсита деформации. Микротвердость H_{μ} прокатанных образцов сплава $\text{Fe}_{40}\text{Mn}_{40}\text{Co}_{10}\text{Cr}_{10}$ значительно возрастает относительно литых заготовок: 3.4 ГПа и 1.4 ГПа, соответственно. Это обусловлено формированием структуры с высокой плотностью дислокаций и пластин мартенсита, выявленных методом просвечивающей электронной микроскопии.

Фазовый состав гомогенизированных по режимам 1–4 образцов, согласно результатам, полученным методами рентгеноструктурного анализа и дифракции обратно рассеянных электронов, представлен только аустенитной фазой. Средние размеры зерен составили 148 ± 77 мкм, 103 ± 47 мкм, 40 ± 20 мкм, 35 ± 17 мкм для образцов, подвергнутых термомеханической обработке по режимам 1–4, соответственно. Формирование более мелкого зерна в таких образцах относительно литого состояния вызывает зернограничное упрочнение и, как следствие, незначительное увеличение микротвердости H_{μ} : для образцов, гомогенизированных по режиму 1 – 1.7 ГПа, по режиму 4 – 2 ГПа.

Таким образом, неоднородное распределение химических элементов, а именно обеднение дендритов по марганцу, способствует прохождению мартенситного превращения в сплаве $\text{Fe}_{40}\text{Mn}_{40}\text{Co}_{10}\text{Cr}_{10}$ в литом состоянии при комнатной температуре. Пластическая деформация приводит к образованию деформационного мартенсита, что сопровождается увеличением микротвердости H_{μ} более чем в два раза относительно литых заготовок. Применение же термомеханических обработок позволяет сформировать однофазную аустенитную гомогенную структуру с крупным размером зерна и микротвердостью ≈ 2 ГПа.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 20-19-00261, <https://rscf.ru/project/20-19-00261/>. Исследования выполнены на оборудовании ЦКП «Нанотех» ИФПМ СО РАН.

Литература

1. Cantor B., Chang I.T.H., Knight P. [et al.] Microstructural development in equiatomic multicomponent alloys // *Materials Science and Engineering: A.* – 2004. – Vol. 375–377. – P. 213–218.
2. Gludovatz B., Ritchie R.O. Fracture properties of high-entropy alloys // *MRS Bulletin.* – 2022. – P. 176–185.
3. Wei D., Li X., Jiang J. [et al.] Novel Co-rich high performance twinning-induced plasticity (TWIP) and transformation-induced plasticity (TRIP) high-entropy alloys // *Scripta Materialia.* – 2019. – Vol. 165. – P. 39–43.

ДВУХСЛОЙНЫЕ ЭЛЕКТРЕТНЫЕ ПОКРЫТИЯ НА ОСНОВЕ ФОСФАТА КАЛЬЦИЯ И ОКСИНИТРИДА ТИТАНА

Т.Д. Джамбулова^{1,2}

¹ *Национальный исследовательский
Томский политехнический университет, Томск*

² *Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

E-mail: tdd2@tpu.ru

Биоматериалы используются в современной медицине для различных целей, таких как восстановление костных тканей, поддержание функций органов и др. Они необходимы в хирургии, стоматологии при создании протезов и имплантатов. Для улучшения успешной остеointеграции с костной тканью широко используются фосфаты кальция, в частности гидроксиапатит (ГА), которые наносят различными способами на имплантаты.

Адгезионная прочность биопокровтий является одной из важных характеристик, определяющих их эксплуатационные свойства. Оксинитрид титана (Ti–O–N) обладает хорошими адгезионными свойствами, что делает его ценным материалом для медицины [1].

Важную роль во взаимодействии биоматериалов с биологическими системами играет их заряд поверхности. Электрически поляризованный ГА усиливает эффект роста костной ткани на покрытии, что является важным эффектом с точки зрения биомедицины [2].

Целью настоящей работы является получение новых композитных покрытий, состоящих из слоев кальций фосфата и оксинитрида титана, а также определение их структуры и свойств.

Образцы титана марки ВТ1-0 в форме пластинок были использованы в качестве подложек. Поверхность обрабатывали с помощью шлифования (марки бумаги Р200, Р600, Р1200, Р1500 и Р2000) с последующим полированием алмазной пастой. Перед нанесением покрытий проводилась очистка поверхности ацетоном и спиртом в ультразвуковой ванне, мойка и сушка. Нанесение покрытий Ti–O–N проводилось методом реактивного магнетронного распыления мишени из Ti в среде азота на лабораторной установке «УВН – 200МИ» (ТПУ). Далее на образцы с Ti–O–N покрытием был нанесен слой кальций-фосфата (КФ) методом ВЧ-магнетронного распыления мишени из ГА с использованием установки «Яхонт – 2М», частота источника которой составляет 13,56 МГц (ИФПМ СО РАН).

Измерение толщины было произведено на образцах-свидетелях из полированного монокристаллического кремния методом спектральной эллипсометрии с использованием комплекса «ЭЛЛИПС – 1891 САГ». Тол-

щина покрытий Ti–O–N составила 200 нм, $n = 2,31$. Толщина покрытий КФ ~ 400 нм, $n = 1,6$.

На разработанной сотрудниками НИ ТПУ и ИФПМ СО РАН установке по измерению интегрального потенциала был измерен потенциал поверхности: для Ti $\phi = 250$ мВ, для Ti–O–N $\phi = 150,056$ мВ, для КФ $\phi = 81,333$ мВ.

Шероховатость поверхности образцов была измерена на профилометре «Профилометр – 130». Измеренная шероховатость по R_a составила для Ti 0,145 мкм, для Ti–O–N 0,174 мкм, для КФ 0,097 мкм. Смачиваемость покрытий определялась путём измерения краевого угла θ , используя установку KRÜSS EasyDrop. При измерениях краевого угла деионизированной водой для Ti $\theta = 71,05^\circ$, для Ti–O–N $\theta = 82,7^\circ$, для КФ $\theta = 54,5^\circ$. При измерениях с глицерином для Ti $\theta = 76,8^\circ$, для Ti–O–N $\theta = 82,4^\circ$, для КФ $\theta = 74,3^\circ$ (рис. 1).

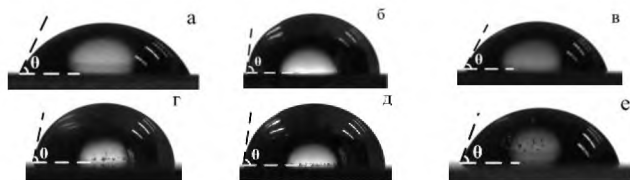


Рис. 1. Форма капли и измерение контактного угла с водой для Ti (а), Ti–O–N (б), КФ (в) и с глицерином для Ti (г), Ti–O–N (д), КФ (е)

Закключение: полученные композитные покрытия являются электретными, несут положительный заряд, имеют заданную толщину. Композитные покрытия являются гидрофильными, поскольку краевой угол смачивания меньше 90° . Кроме того, гидрофильные свойства КФ покрытий более выражены в сравнении с Ti–O–N покрытием и с поверхностью без покрытий.

Литература

1. Коницев М.Е., Кузьмин О.С., Пичугин В.Ф., М. Эшле. Структура и свойства покрытий на основе Ti–O–N, сформированных методом реактивного магнетронного распыления // Известия вузов. Физика. – 2013. – Т. 56, № 10. – С. 35–40.
2. Шаркеев Ю.П., Попова К.С., Просолов К.А. [и др.] Электрический потенциал и топография поверхности кальций-фосфатного покрытия, полученного в плазме ВЧ-разряда // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования / Российская академия наук, Институт физики твердого тела. – 2020. – № 2. – С. 95–102.

ОДНОСТОРОННИЙ И ДВУСТОРОННИЙ ЭФФЕКТ ПАМЯТИ ФОРМЫ В [001]-МОНОКРИСТАЛЛАХ $\text{Ni}_{54-x}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27}\text{Co}_x$ ($x = 10, 12, 15$) (ат. %)

М.С. Дмитриенко, М.В. Жердева

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: max06.2002@mail.ru

Известно, что для улучшения функциональных свойств сплавов с памятью формы используется старение в мартенсите под сжимающей нагрузкой (СМН). В процессе СМН происходит стабилизация мартенсита, что способствует увеличению температур мартенситного перехода, наведению двустороннего эффекта памяти формы (ДЭПФ) при охлаждении/нагреве без внешней нагрузки. Повысить эффективность СМН возможно благодаря увеличению температуры старения и времени выдержки в мартенситном состоянии. Данная работа посвящена исследованию влияния СМН на закономерности развития ЭПФ и ДЭПФ в [001]-монокристаллах $\text{Ni}_{54-x}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27}\text{Co}_x$ ($x = 10, 12, 15$) (ат. %) при деформации сжатием. При концентрации кобальта $C_{\text{Co}} = 0 - 6$ ат. % проведены подробные исследования СМН, например, в работе [1]. Однако при концентрации кобальта более 10 ат. % в литературе нет описания влияния СМН на развитие термоупругих мартенситных превращений (МП).

Выращенные методом Бриджмена образцы монокристаллов имели форму параллелепипедов размерами $(6 \times 3 \times 3)$ мм³. После роста монокристаллы $\text{Ni}_{44}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27}\text{Co}_{10}$ выдерживали при температуре 1448 К, 1 ч в трубке с гелием с последующей закалкой в воду. В исходных монокристаллах $\text{Ni}_{42}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27}\text{Co}_{12}$ и $\text{Ni}_{39}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27}\text{Co}_{15}$ термоиндуцированные МП подавлены. При охлаждении происходит strain glass переход [2]. Для наведения термоиндуцированного МП, время отжига образцов было увеличено до 8 и 12 часов соответственно. Далее на образцах проводили СМН на электромеханической настольной разрывной машине Instron VHS 5969. Схема СМН представлена в работе [3]. Температура испытания составляла 398 К. Монокристаллы выдерживали в мартенсите под нагрузкой в течение 3 ч. Нагрузка старения в мартенсите составляла $\sigma = 650 - 700$ МПа.

Экспериментально было установлено, что во всех монокристаллах $\text{Ni}_{54-x}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27}\text{Co}_x$ ($x = 10, 12, 15$) (ат. %) независимо от содержания кобальта наблюдается ДЭПФ после СМН. ДЭПФ возникает за счет изменения конфигурации точечных дефектов в соответствии с симметрией мартенсита. В зависимости от содержания кобальта изменяется величина ДЭПФ, а именно $\varepsilon = 5,1$ % для $\text{Ni}_{44}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27}\text{Co}_{10}$, $\varepsilon = 0,7$ % для

$\text{Ni}_{42}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27}\text{Co}_{12}$ и $\varepsilon = 0,3 \%$ для $\text{Ni}_{39}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27}\text{Co}_{15}$. То есть, с увеличением концентрации кобальта от $C_{\text{Co}} = 10$ ат. % до $C_{\text{Co}} = 15$ ат. % величина ДЭПФ уменьшается от $\varepsilon = 5,1 \%$ до $\varepsilon = 0,3 \%$, соответственно. Также в исследованных монокристаллах NiFeGaCo , после старения, температуры образования мартенсита при охлаждении/нагреве увеличиваются на $30 \div 70$ К по сравнению с исходным состоянием. Повышение температуры МП после СМН обусловлено тем, что низкотемпературная фаза становится более стабильной за счёт снижения свободной энергии.

При охлаждении/нагреве под нагрузкой (при развитии ЭПФ) во всех монокристаллах $\text{Ni}_{54-x}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27}\text{Co}_x$ ($x = 10, 12, 15$) (ат. %). СМН практически не влияет на величину обратимой деформации. Для монокристаллов $\text{Ni}_{44}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27}\text{Co}_{10}$ и $\text{Ni}_{39}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27}\text{Co}_{15}$ форма кривых остается неизменной. Однако в монокристаллах $\text{Ni}_{42}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27}\text{Co}_{12}$ после старения происходит значительное расширение интервала температур прямого МП. Его значение составляет $\Delta T_{\text{после СМН}} = 202$ К, что на 101 К больше по сравнению с исходным состоянием. Это свидетельствует о накоплении упругой энергии при развитии МП.

Таким образом, СМН приводит к наведению ДЭПФ во всех исследованных монокристаллах. СМН способствует увеличению температуры образования мартенсита и расширению температурных интервалов развития МП под нагрузкой. Увеличение концентрации кобальта $C_{\text{Co}} = 10 \div 15$ ат. % в кристаллах NiFeGaCo приводит к снижению величины ДЭПФ от $\varepsilon = 5,1 \%$ при $C_{\text{Co}} = 10$ ат. % до $\varepsilon = 0,3 \%$ при $C_{\text{Co}} = 15$ ат. %.

Автор выражает благодарность к.ф.-м.н. Е.Е. Тимофеева, д.ф.-м.н. Е.Ю. Панченко и д.ф.-м.н., проф. Ю.И. Чумлякову за организацию исследовательской работы и обсуждение полученных результатов.

Литература

1. Panchenko E.Yu. et al. Two-way shape memory effect under multi-cycles in [001]-oriented $\text{Ni}_{49}\text{Fe}_{18}\text{Ga}_{27}\text{Co}_6$ single crystal // *Materials Science & Engineering A*. – 2017. – Vol. 706. – P. 95–103.
2. Haiyang Chen. et al. Unprecedented non-hysteretic superelasticity of [001]-oriented NiCoFeGa single crystals // *Nature Materials*. – 2020. – Vol. 19. – P. 712–718.
3. Eftifeeva A.S. et al. Superelasticity and elastocaloric cooling capacity in stress-induced martensite aged [001]_A-oriented $\text{Ni}_{54}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27}$ single crystals // *Materials Science & Engineering A*. – 2022. – Vol. 855. Art. num. 143855.

ПОЛУЧЕНИЕ МАГНЕТИТА ПУТЕМ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ МЕХАНИЧЕСКОЙ АКТИВАЦИИ ГЕМАТИТА В ШАРОВОЙ МЕЛЬНИЦЕ

В. Д. Елькин, С. Бобуёк

*Национальный исследовательский
Томский политехнический университет, Томск*

E-mail: vde2@tpu.ru

Механическая активация является важным процессом в химической промышленности, особенно в области получения материалов с высокими механическими свойствами. Этот процесс используется для изменения структуры и свойств материалов, что может привести к повышению их качества и эффективности в различных областях применения.

Нанопорошок магнетита Fe_3O_4 представляет интерес для науки из-за его магнитных свойств, возможности применения в качестве катализатора [1], для очистки водных ресурсов от разлива нефтепродуктов [2, 3].

Целью настоящей работы является изучение фазовых превращений в порошке Fe_2O_3 при высокоэнергетической механической активации в шаровой мельнице Retsch Emax с перспективой получения нанопорошка магнетита Fe_3O_4 . При этом использовались стальные барабаны и шары диаметром 5 мм. Обработка в мельнице проводилась в течении 15, 30 и 60 минут при скорости вращения мельницы 500, 1 000, 1 500, 2 000 оборотов в минуту. Комбинации режимов обработки и времени активации представлены в таблице.

Обозначение образцов и режимов активации

Время активации, мин	Частота вращения мельницы, об/мин			
	500	1000	1500	2000
15	E1	E4	E7	E10
30	E2	E5	E8	E11
60	E3	E6	E9	E12

Полученные после активации порошки изучали с помощью термогравиметрии в магнитном поле и рентгенофазового анализа.

В работе установлено, что при механоактивации гематита Fe_2O_3 происходит его восстановление и превращение в магнетит Fe_3O_4 . При этом сама возможность такой реакции зависит в первую очередь от энергонапряженности обработки. Полученные данные позволяют предположить, что существует энергетическая граница, ниже которой трансформация почти не происходит. Как видно из рис. 1, значительное накопление

Fe_3O_4 обнаружено только в образцах E10-12, которые активировались при частоте вращения 2 000 об/мин. Только по достижению предполагаемой энергетической границы на процесс накопления магнетита начинает влиять время активации, с ростом которого увеличивается и содержания магнетита.

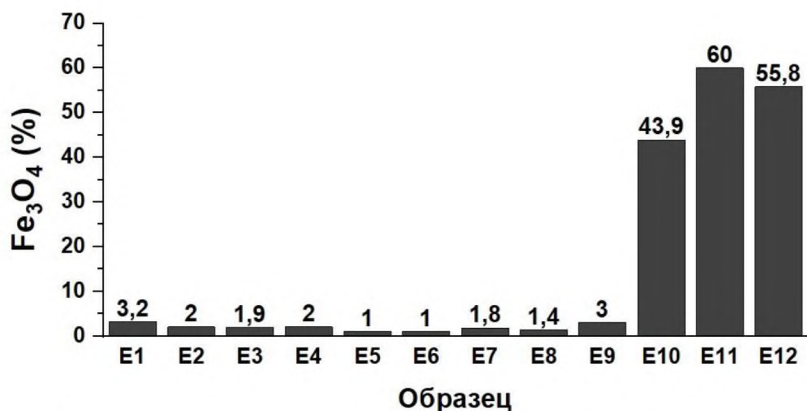


Рис. 1. Содержание магнетита Fe_3O_4 в порошках, полученных при разных режимах работы шаровой мельницы

Авторы выражают благодарность научному руководителю д.т.н., профессору, Лысенко Е.Н. и коллегам из ПНИЛ ЭДиП за организацию исследовательской работы и обсуждения полученных результатов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания в сфере научной деятельности (проект FSWW-2023-0011).

Литература

1. Вайтулевич Е.А. Сорбенты на основе наночастиц магнетита для применения в биомедицине // Российские нанотехнологии. – 2019. – № 14. – С. 31–38.
2. Кильдишева В. А. Синтез композитных структур с наночастицами магнетита, включенными в микрочастицы карбоната кальция // Тенденции развития науки и образования. – 2021. – № 72-2. – С. 155–158.
3. Невмывака А. А. Наноразмерный порошок магнетита как материал для сбора нефтепродуктов с водной поверхности // Российские нанотехнологии. – 2018. – № 9–10. – С. 20–24.

СИНТЕЗ ЛИТИЕВЫХ ФЕРРИТОВ, МОДИФИЦИРОВАННЫХ ОКСИДОМ ГАДОЛИНИЯ

Ю.С. Елькина, И.А. Майдоров

*Национальный исследовательский
Томский Политехнический Университет, Томск*

E-mail: ysm7@tpu.ru

Модификация литиевых ферритов различными ионами металлов (Ni^{2+} , Ti^{3+} , Zn^{2+} , Mn^{2+}) в последние годы становится все более востребованной областью исследования. Введение дополнительных компонентов позволяют получать материалы с различным сочетанием магнитных и электрических свойств. За счет этого, расширяется область применения данных ферритов и появляется возможность использовать их в качестве магнитного материала для сердечников трансформаторов, антенн, устройств магнитной записи и т.д. Стремление получить магнитные материалы с новым сочетанием свойств привело к тому, что начались исследования по модификации литиевых ферритов редкоземельными элементами (РЗЭ), такими как лантан, самарий, тербий и др. [1–2].

В настоящей работе методами рентгенофазового (РФА), термогравиметрического (ТГ) и дифференциально-сканирующего калориметрического (ДСК) анализов проведены исследования синтеза литиевого феррита, модифицированного оксидом гадолиния $\text{Li}_{0.5}\text{Gd}_x\text{Fe}_{2.5-x}\text{O}_4$ ($x = 0; 0,06; 0,2$). Данные образцы были получены путем смешивания химических реагентов $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{Li}_2\text{CO}_3/\text{Gd}_2\text{O}_3$ в определенном весовом соотношении в планетарной мельнице и синтезированы твердофазным методом в лабораторной печи при температуре 900°C в течение 240 минут [3].

Дифракционные картины регистрировались на дифрактометре ARL X'TRA (Швейцария); для полнопрофильного анализа рентгенограмм использовалось программное обеспечение PowderCell 2.4. Идентификация фаз проводилась с использованием базы данных порошков PDF-4 + Международного центра дифракционных данных (ICDD). Результаты рентгенофазового анализа показали наличие в образцах двух фаз: шпинельной фазы $\alpha\text{-Li}_{0.5}\text{Fe}_{2.5}\text{O}_4$ и кристаллической вторичной фазы GdFeO_3 . Параметр решетки литиевого феррита уменьшается при увеличении содержания гадолиния.

ТГ и ДСК исследования, включая измерения с приложением магнитного поля, проводилось на воздухе с использованием синхронного термического анализатора Netzsch STA 449C Jupiter. Измерения образцов проводились как на стадии нагрева до 900°C , так и на стадии последующего охлаждения до комнатной температуры. Скорость нагрева и охлаждения составляла $10^\circ\text{C}/\text{мин}$. (рис. 1). Термический анализ подтвердил

наличие $\alpha\text{-Li}_{0.5}\text{Fe}_{2.5}\text{O}_4$ в синтезированном образце, о чем свидетельствует эндотермический пик на кривой ДСК при охлаждении, связанный с $\beta\text{-}\alpha$ переходом в данной фазе. Изменение массы на охлаждении свидетельствует о переходе образца из парамагнитного состояния в ферромагнитное в районе температуры Кюри.

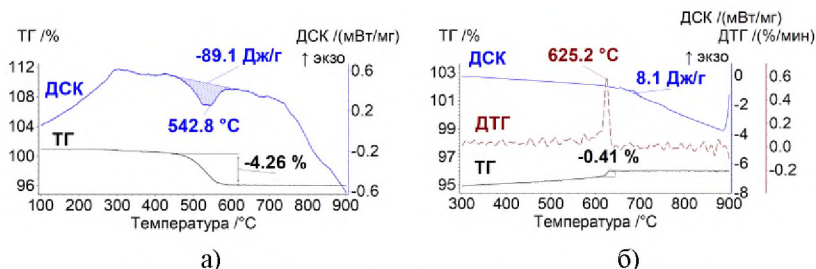


Рис. 1. ТГ/ДСК кривые при нагреве (а) и охлаждении (б) для образца $\text{LiGd}_{0.2}$

Авторы выражают огромную благодарность научному руководителю д.т.н., профессору, Лысенко Е.Н. и коллегам из ПНИЛ ЭДиП за организацию исследовательской работы и обсуждения полученных результатов. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания в сфере научной деятельности (проект FSWW-2023-0011).

Литература

1. Mahmoudi M., Kavanlouei M., Maleki-Ghaleh H. Effect of composition on structural and magnetic properties of nanocrystalline ferrite $\text{Li}_{0.5}\text{Sm}_x\text{Fe}_{2.5-x}\text{O}_4$. // Powder Metallurgy and Metal Ceramics. – 2015. – Vol. 54. – P. 31–39.
2. Rady K.E., Shams M.S. Study the effect of Gd^{3+} incorporation into nanocrystalline (Ni–Ti) substituted Mn–Zn ferrites on its structure and functional properties. // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2017. – Vol. 426. – P. 615–620.
3. Lysenko E.N., Vlasov V.A., Nikolaeva S.A., Nikolaev E.V. TG, DSC, XRD, and SEM studies of the substituted lithium ferrite formation from milled $\text{Sm}_2\text{O}_3/\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{Li}_2\text{CO}_3$ precursors // J. Therm. Anal. Calorim. – 2023 – Vol. 148. – P. 1445–1453.

ОРИЕНТАЦИОННАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СВОЙСТВ В МОНОКРИСТАЛЛАХ Ti-51,5 ат. % Ni

М.В. Жердева

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: zhmv98@mail.ru

В настоящем исследовании рассматривается вопрос об изменении свойств высоконикелевых сплавов TiNi при старении под нагрузкой. Основное внимание уделено влиянию числа вариантов частиц Ti_3Ni_4 на свойства сплавов: появление двустороннего эффекта памяти формы (ДЭПФ) и изменение параметров эффекта памяти формы (ЭПФ) [1, 2]. В данной работе выбран сплав с высоким содержанием никеля $C_{Ni} > 51,2 \%$, [001]- и [111]- ориентацией, что и отличает исследование от предыдущих [1, 2]. Работ по изучению ДЭПФ при старении под нагрузкой в высоконикелевых [111]-монокристаллах TiNi известно мало, а вдоль [001]-ориентации исследований не проводилось.

В работе исследовались монокристаллы Ti-51,5 ат. % Ni. Образцы были вырезаны размером $3 \times 3 \times 6$ мм³ с ориентацией оси сжатия вдоль [001]- и [111]- ориентации. После проведен высокотемпературный отжиг (1253 К, 1 ч) и старение в вакуумной установке (823 К, 1 ч). Часть образцов подвергалась старению под сжимающей нагрузкой 150 МПа, часть – в свободном состоянии. Полное описание методики старения приведено в [2].

Монокристаллы, состаренные без нагрузки, содержат 4 варианта частиц Ti_3Ni_4 диаметром 250–300 нм с плоскостью габитуса $\{111\}_{B2}$. В состаренных под нагрузкой монокристаллах выделяется один вариант частиц Ti_3Ni_4 , которые смыкаются, образуя длинные параллельные волнообразные области длиной не менее 5 мкм и шириной от 50 до 100 нм.

Во всех состаренных монокристаллах наблюдаются двустадийное мартенситное превращение (МП) $B2 \rightarrow R \rightarrow B19'$ при охлаждении. При старении под нагрузкой температура начала МП M_s увеличивается относительно монокристаллов, состаренных в свободном состоянии, на 23 К из-за локальных напряжений, создаваемых ориентированными частицами. Локальные напряжения образуют внутренние дальнедействующие поля и способствуют формированию мартенсита. Оценка внутренних полей напряжений составляет 180 МПа.

Исследования состаренных под нагрузкой [001]- и [111]- монокристаллов показали, что сжимающий ДЭПФ наблюдается вдоль [001]-ориентации с величиной обратимой деформации $\epsilon_{обр} = -0,2 \%$, в то время как растягивающий ДЭПФ характерен для [111]-монокристаллов с $\epsilon_{обр} = +0,6\%$. Направле-

ние ДЭПФ зависит от расположения частиц в матрице, которые создают растягивающие поля напряжений в направлении нормали к плоскости габитуса и сжимающие поля в плоскости габитуса на торцах частиц [3]. При старении под нагрузкой вдоль [111]-направления частицы вырастают под углом 90° к оси сжатия. Значит, в [111]-монокристаллах при исследовании ДЭПФ работают растягивающие поля напряжений, что приводит к увеличению размера образца. Напротив, образцы, состаренные под нагрузкой, но вырезанных вдоль [001]-направления, при исследовании ДЭПФ действуют сжимающие поля напряжений, что уменьшает размер образца.

Приложение нагрузки на образец приводит к появлению ЭПФ. В [001]-монокристаллах старение под нагрузкой слабо влияет на величину максимальной обратимой деформации ЭПФ и составляет 1,5–1,7%. Состаренные под и без нагрузки [001]-монокристаллы испытывают сжимающие напряжения на протяжении всего эксперимента (внешние напряжения складываются с внутренними). В [111]-монокристаллах, напротив, влияние ориентированных частиц велико. Максимальная деформация при ЭПФ в монокристаллах, состаренных под нагрузкой и без нагрузки, различается в 2 раза и составляет 0,5% и 1,1% при 500 МПа, соответственно. Различие в величине обратимой деформации связано с наличием растягивающих полей напряжений в [111]-монокристаллах, состаренных под нагрузкой. При напряжениях ниже 200 МПа наблюдается растягивающий ЭПФ, величина которого уменьшается с ростом напряжений. После 200 МПа наблюдается сжимающий ЭПФ.

Автор выражают благодарность научным руководителям Е.Е. Тимофеевой, Е.Ю. Панченко, Ю.И. Чумлякову за организацию исследовательской работы и обсуждение полученных результатов. Результаты были получены в рамках выполнения государственного задания Минобрнауки России, проект № FSWM-2024-0007.

Литература

1. Sehitoglu H. Shape memory and pseudoelastic behavior of 51.5%Ni-Ti single crystals in solutionized and overaged state // *Acta Materialia*. – 2001. – V. 49, Is. 17. – P. 3609–3620.
2. Timofeeva E.E. Effect of one family of Ti_3Ni_4 precipitates on shape memory effect, superelasticity and strength properties of the B2 phase in high-nickel [001]-oriented Ti-51.5at.%Ni single crystals // *Materials Science and Engineering A*. – 2022. – Vol. 832. – P. 142420.
3. Otsuka K. Physical Metallurgy of Ti-Ni Based Shape Memory Alloys // *Progress in Materials Science*. – 2005. – Vol. 50. – P. 511–678.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ ПЛОТНОСТИ ЭНЕРГИИ ИЗДЕЛИЯ, ПОЛУЧЕННОГО ПРИ ПОМОЩИ АДДИТИВНОЙ ТЕХНОЛОГИИ СЕЛЕКТИВНОГО ЛАЗЕРНОГО ПЛАВЛЕНИЯ (SLM)

А.А. Зобова

*Санкт-Петербургский Государственный
политехнический университет, Санкт-Петербург*

E-mail: zobova.2019@mail.ru

Для создания изделий из металлов используют различные технологии обработки, к числу которых относятся литейное производство, обработка резанием, различные виды сварки, обработка давлением, а также 3D-печать. Технология 3D-печати является наиболее современным способом обработки металлов, позволяющим с помощью специальных лазерных принтеров получать металлические изделия любых форм, включая сложные по конфигурации изделия. Необходимо отметить, что при использовании данного метода обеспечивается наименьшая погрешность, что обеспечивает высокоточное изготовление изделий из различных металлов с заранее заданными параметрами [1].

Исследование зависимости плотности энергии проводилось на образцах стали 20X13, созданных технологией селективного лазерного плавления (selective laser melting – SLM) для дальнейшего производства деталей сложной геометрической формы.

Сталь 20X13 относится к сталям мартенситного класса, является коррозионностойкой и жаропрочной. Данную сталь применяют для изготовления деталей с повышенной пластичностью, подвергающихся ударным нагрузкам и эксплуатируемых при температуре до 450–500°C. Указанные характеристики рассматриваемого материала позволяют успешно использовать его для изготовления изделий сложной формы в различных отраслях промышленности и, в особенности, в военной промышленности.

Порошок для данных исследований был получен в научно-исследовательском институте прикладного материаловедения АО «Концерн ВКО «Алмаз-Антей» методом распыления расплава в газовой среде. Указанный метод широко используется для получения порошков инструментальных сталей, нержавеющей и конструкционных сталей [2]. В зависимости от технологического режима формируются порошки несферической формы с размером частиц от 50 мкм и выше. Процесс отличается высокой производительностью (до 20–25 кг распыляемого материала в минуту).

По результатам проведённых исследований была получена зависимость плотности энергии изделия, полученного аддитивной технологией селективного лазерного плавления (SLM), от пористости (рис. 1). Для установления зависимости была использована формула плотности энергии $E = \frac{P}{vst}$, где P – мощность лазера, Вт; v – скорость сканирования, мм/с; s – расстояние между треками, мм; t – толщина слоя, мм.

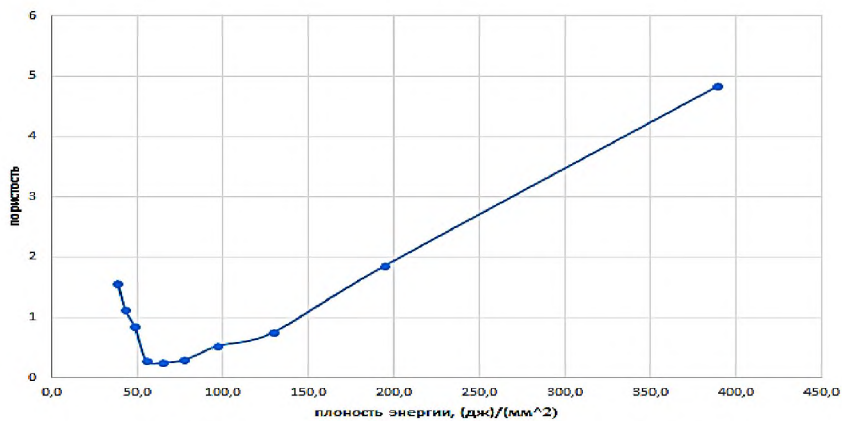


Рис. 1. Зависимость пористости металла от плотности энергии

Изменяя один из параметров режима работы лазера, а именно его скорость, было установлено, что чем меньше данная величина, тем выше величина плотности энергии и тем пористость получаемого изделия выше.

Автор выражает благодарность Нефедовой Л.А., Котову С.А., Христюку Н.А. за организацию исследовательской работы и обсуждение полученных результатов. Результаты получены с использованием оборудования научно-исследовательского института прикладного материаловедения концерна ВКО «Алмаз-Антей».

Литература

1. Марка стали 20X13, характеристики стали. URL: <https://engineer.ru/materials/zharoprochnye/stal-20h13-korrozionostojkaya-zharoprochnaya-martensitnaya/>
2. Рудской А.И. [и др.]. Физические процессы и технологии получения металлических порошков из расплава. – СПб. : Изд-во Политехн. ун-та, 2018. – С. 555–557.

ОСОБЕННОСТИ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО ОКИСЛЕНИЯ ИНТЕРМЕТАЛЛИДА Ni_3Al , ОБРАБОТАННОГО ВОЗДЕЙСТВИЕМ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СИЛЬНОТОЧНОГО ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА

Е.К. Иванова^{1,2}

¹*Национальный исследовательский*

Томский государственный университет, Томск

²*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

E-mail: iv.zhenya2005@yandex.ru

Интерметаллиды системы Ni-Al обладают существенным сопротивлением окислению вплоть до температуры 1000°C из-за формирования слоя оксида алюминия на поверхности. В частности, при высокой температуре интерметаллид Ni_3Al обладает высокой прочностью, стойкостью к окислению и коррозии, поэтому он применяется в промышленности для изготовления направляющих рельсов и роликов в печах для термической обработки, крепежных элементов, элементов конструкций химических производств, работающих в условиях высокой температуры и агрессивной среды, и тому подобное.

Актуальной задачей является разработка способов увеличения срока службы деталей и конструкций, изготовленных из интерметаллида Ni_3Al за счет увеличения их сопротивления окислению. Для её решения перспективно применение специальных поверхностных обработок, например, воздействием концентрированными потоками энергии. Одним из таких воздействий является облучение низкоэнергетическим сильноточным электронным пучком (НСЭП). Было показано, что воздействие НСЭП в некоторых материалах, в частности, термобарьерных покрытиях, увеличивает сопротивление окислению за счет формирования более совершенной структуры в тонком приповерхностном слое.

В связи с этим целью работы было провести сравнительное исследование кинетики окисления интерметаллида Ni_3Al , полученного методом самораспространяющегося температурного синтеза (СВС), в состоянии после синтеза и после дополнительного воздействия НСЭП, и выявить структурные факторы, влияющие на скорость окисления в обоих случаях.

Образцы для исследований размером $15 \times 15 \times 0,7$ мм вырезали из СВС компакта электроискровым способом. Обе плоские поверхности образцов шлифовали на наждачной бумаге и механически полировали с уменьшением размера абразива до 1 мкм. Часть образцов облучали НСЭП с обеих сторон с плотностью энергии облучения 8 Дж/см^2 , энергия электронов 30 кВ, число импульсов 10. Окисление образцов вели на воздухе при температуре 1000°C . Для исследования кинетики окисления образцы вместе с

тиглями периодически извлекали из печи и взвешивали с точностью $\pm 0,1$ мг. Структурные исследования окисленной поверхности и поперечного сечения образцов проводили методом РЭМ и рентгеновского микроанализа, фазовый состав определяли рентгеновским методом.

Зависимость прироста массы образцов от времени приведена на рис. 1 слева. Экспериментальные данные были интерполированы параболической зависимостью. Видно, что на начальном этапе окисления прирост массы в образце после воздействия НСЭП превышает соответствующий в образце без воздействия. Однако с течением времени прирост массы в первом случае замедляется быстрее, и с момента времени окисления 4000 минут прирост массы образца после облучения становится меньше, чем соответствующий образца без воздействия.

Исследование поверхности образцов после окисления методом РЭМ обнаружило присутствие частиц оксида никеля (NiO). В образце после воздействия НСЭП частицы располагаются в области трещин, а пространство между трещинами свободно от оксида никеля (рис. 1, справа). В образце без воздействия частицы оксида никеля располагаются на поверхности равномерно. Можно предположить, что величина эффекта общего увеличения сопротивления окислению интерметаллида Ni_3Al в результате воздействия НСЭП снижается из-за интенсивного окисления в области трещин. Для увеличения сопротивления окислению воздействием НСЭП необходимо выбирать режим обработки, обеспечивающий отсутствие трещин на поверхности.

Исследование выполнено за счет гранта РФФИ № 23-29-00673.

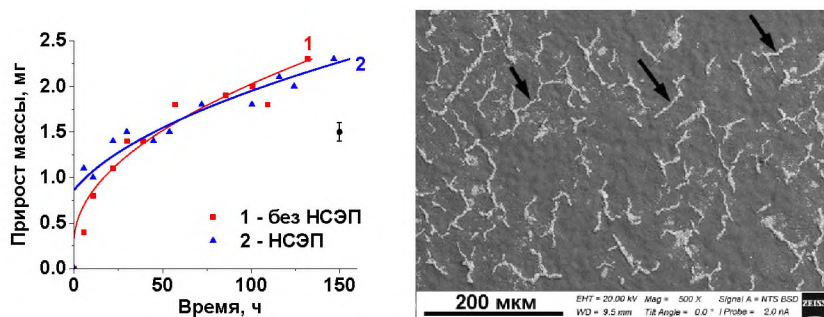


Рис. 1. Слева – зависимость прироста массы от времени окисления. Справа – РЭМ изображение поверхности образца после воздействия НСЭП и окисления. Стрелками указаны частицы NiO

ЭЛЕКТРОННО-МИКРОСКОПИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ МИКРОСТРУКТУРЫ СПЛАВА ВТ6, МОДИФИЦИРОВАННОГО РАДИАЛЬНО-СХОДЯЩИМСЯ ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ

Д.Р. Иргизцев

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: postuplenieVuz@yandex.ru

В настоящее время несмотря на появление композиционных наноматериалов, используемых при создании космических аппаратов и авиалайнеров, металлические сплавы по-прежнему не утратили свою актуальность. Титановые сплавы, одним из представителей которых является ВТ6, обладают широким спектром механических свойств: высокая прочность и твердость, устойчивость к воздействию коррозионных сред, удовлетворительная пластичность. Однако сплав ВТ6 имеет недостатки, связанные со слабыми трибологическими свойствами, низкой усталостной долговечностью, что существенно снижает срок службы титановых изделий. В конце прошлого века была реализована идея повышения механических свойств сплавов посредством воздействия на поверхностные слои низкоэнергетическими сильноточными электронными пучками (НСЭП). Обработка данным типом пучков приводит к конфигурационным изменениям в структуре материала на масштабах микро и нано, например, к фазовым превращениям. Целью данной работы является определение структурных особенностей быстрозакаленного поверхностного слоя сплава ВТ6, обработанного радиально сходящимся НСЭП, методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ).

Образцами для исследований выступали пластинки размером $12 \times 10 \times 1.35$ мм из промышленного сплава ВТ6 (ПАО «ТД Корпорация ВСМПО-АВИСМА», Россия), вырезанные вдоль оси прутка. Химический состав сплава, согласно сертификату, составлял Ti–6.36 Al–4.09 V–0.010 Zr–0.016 Si–0.19 Fe–(C, O, N, H) < 0.4 ост. (вес. %). Подложки подвергали механической полировке на абразивах SiC разной зернистости и с помощью алмазной суспензии (1 мкм и 0.25 мкм). Обработку радиально-сходящимся НСЭП осуществляли на установке «МикрЭп» в режиме: плотность энергии $E_s = 3.7$ Дж/см², количество импульсов $n = 10$, ускоряющее напряжение $U \leq 17$ кВ, длительность импульса $\tau = 2.5$ мкс. Структуру образцов оценивали методами ПЭМ на микроскопе JEM 2100 (Jeol, Япония) в режимах светлого, темного поля и дифракции при ускоряющем напряжении 200 кВ. Фольги готовили на установке ионного травления EM 09100IS (Jeol, Япония) в геометрии «cross-section».

В исходной структуре сплава ВТ6 были обнаружены две фазы ($\alpha+\beta$). Зерна α -фазы размером до 2 мкм содержат дефекты упаковки и дислокационные скопления. В β -фазе, распределенной в виде тонких прослоек между зернами α -фазы, наблюдается низкая плотность дислокационных дефектов. Поверхностный слой сплава ВТ6, обработанного радиально-сходящимся НСЭП, состоит из зоны плавления толщиной ~ 6 мкм и зоны термического влияния (ЗТВ), простирающейся на глубину до ~ 15 мкм. После модификации радиально-сходящимся НСЭП в поверхностном перекристаллизованном слое сформировалась однофазная структура на основе α' -мартенсита пластинчато-игольчатой морфологии. Мартенситные кристаллы характеризуются множеством ориентационных вариантов, что говорит о самоаккомодированной природе мартенсита (напряжений). На глубине $\sim 6\text{--}10$ мкм от поверхности облучения в слое, соответствующем ЗТВ, обнаруживаются области с исходной β -фазой, и сохраняется структура зерен α -фазы. В ЗТВ матричная α -фаза содержит дефекты кристаллического строения (двойники, дислокационные сетки и скопления) большей плотности (рис. 1).

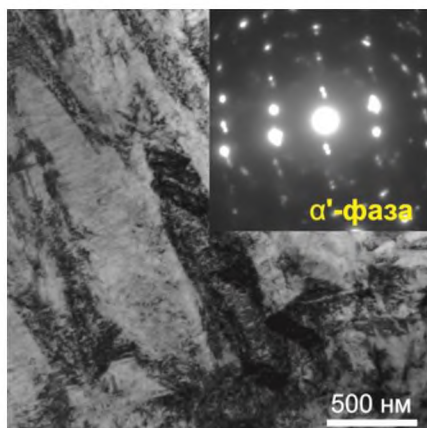


Рис. 1. Светлопольное изображение и микродифракционная картина (во вставке) сплава ВТ6, обработанного радиально-сходящимся НСЭП

Исследование структуры выполнены в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, проект FWRW-2021-0003. Автор выражает благодарность научному руководителю, к.ф.-м.н., н.с. ЛМПиН ИФПМ СО РАН Семиному В.О. за помощь в проведении исследований и полезные обсуждения.

КАРТИНЫ ЛОКАЛИЗОВАННОЙ ПЛАСТИЧНОСТИ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

П.В. Исхакова

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

E-mail: iskhakova.polina@gmail.com

Большинство эффектов влияния температуры на характеристики деформации и разрушения металлов объясняются температурной зависимостью напряжения, необходимого для преодоления дислокациями препятствий. Сложность макроскопического поведения пластически деформируемых твердых тел связана с тем, что ансамбль взаимодействующих дислокаций представляет собой пример нелинейной диссипативной системы [1]. Таким образом, возникает потребность в проведении комплексных исследований крупномасштабных проявлений самоорганизации в рамках классических и нетрадиционных экспериментальных и теоретических подходов.

В исследованиях последних лет [2] было установлено, что пластическое течение металлов и сплавов является локализованным, начиная от предела текучести и заканчивая разрушением, причем формы локализации зависят от действующего на каждой стадии процесса течения закона деформационного упрочнения. Проверка этих закономерностей на чистых металлах и сплавах позволила установить общность этого утверждения, интерпретировать наблюдаемые особенности как результат самоорганизации элементарных актов пластичности, рассмотреть их как различные виды диссипативных структур (автоволновых процессов) в деформируемой среде [1] и получить обширную количественную информацию о характере автоволн локализации деформации [2]. Было установлено, что пространственный период локализованной деформации зависит от: размера зерна деформируемого материала по логистическому закону; длины нагружаемого образца по логарифмическому закону; характерного размера дислокационной субструктуры по линейному закону [2]. И для полного понимания деформационного поведения необходимы сведения о закономерностях и параметрах автоволн локализации пластической деформации металлов в широком температурном интервале.

Настоящая работа посвящена исследованию картин локализации пластической деформации в температурном интервале $173\text{ K} < T < 297\text{ K}$. Механические испытания на одноосное растяжение проводили на плоских образцах сплава А5М (содержание Al – не менее 99,5 масс.%) с размером зерна 10,5 мкм при постоянной скорости движения подвижного захвата испытательной машины «Instron-1185». Температуру поддерживали постоянной с помощью непрерывной подачи паров азота из сосуда

Дьюара в рабочую камеру. Анализ распределений локальных деформаций в процессе нагружения проводили методом двухэкспозиционной спекл-фотографии [2].

Показано, что вся пластическая деформация образца оказывается сосредоточенной в небольшом числе очагов локализованной деформации, которые могут быть подвижными или стационарными (рис. 1). Материал между такими очагами пластически не деформируется, так что анализ процесса пластического течения может быть сведен к изучению кинетики развития картины локализации пластической деформации.

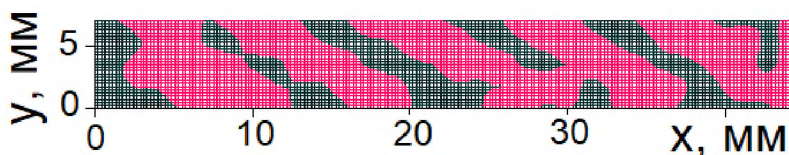


Рис. 1. Распределение очагов локализованной пластичности Al на стадии параболического деформационного упрочнения при $T = 173\text{ K}$

Использование автоволновых картин пластического течения позволило получить более полную и точную информацию в широком температурном интервале о запасе пластичности металла по сравнению с традиционными характеристиками, например, удлинением и сужением поперечного сечения. Установлена температурная зависимость пространственного периода локализации деформации на стадиях параболического деформационного упрочнения.

Автор выражает благодарность научному руководителю Баранниковой С.А. за организацию исследовательской работы и обсуждение полученных результатов. Исследование выполнено в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема номер FWRW-2021-0011.

Литература

1. Васильев В.А., Романовский Ю.М., Яхно В.Г. Автоволновые процессы. – М.: Наука, 1987. – 240 с.
2. Зуев Л.Б., Баранникова С.А., Лунев А.Г. От макро к микро. Масштабы пластической деформации. – Новосибирск: Наука, 2018. – 132 с.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ СЕГРЕГАЦИИ GE ПРИ МОЛЕКУЛЯРНО-ПУЧКОВОЙ ЭПИТАКСИИ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ GE-SI

А. Д. Ишков

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: penitutum@gmail.com

Наногетероструктуры Ge/Si с квантовыми точками Ge представляют интерес как для создания приборов опто- и нанoeлектроники, так и в качестве модельной системы для исследования процессов эпитаксиального роста по механизму Странского-Крастанова.

Одним из важных процессов при росте кристаллических слоев в данной системе является поверхностная сегрегация атомов Ge. Этот процесс означает накопление Ge на поверхности без встраивания в объем. Сегрегация Ge энергетически выгодна по причине того, что энергия связи Ge ниже, чем у Si, что обуславливает более низкое значение поверхностной энергии [1].

Полагается, что встраивание адатомов Ge в твердый раствор Ge-Si происходит как посредством встраивания в моноатомные ступени, так за счет обмена с атомом Si в поверхностном слое. Соответственно, сегрегация может происходить как посредством перескока адатома Ge через движущуюся ступень, так и за счет обратного процесса обмена атома Ge в поверхностном слое с адсорбированным атомом Si. Существенно, что при высоких концентрациях адатомов Ge имеет место процесс самоблокирования, когда обмен атомами одного и того же элемента не приводит к изменению концентрации данных атомов в адсорбционном и поверхностном слоях [2]. В данной работе предлагается модель сегрегации Ge в Si, учитывающая данный эффект.

Модель основана на обобщении модели поверхностной сегрегации примеси при дельта-легировании, предложенной в работе [3] (рассматривается сегрегация Ge предосаждённого на поверхность Si при заращивании кремнием из молекулярного пучка). В обобщенной модели частоты перехода атомов Ge из адслоя в поверхностный слой и обратно полагаются равными произведению соответствующих констант перехода на концентрацию атомов Si в поверхностном слое и в адслое, соответственно. Полагается, что концентрация Ge в поверхностном слое непосредственно за фронтом движущейся ступени равна концентрации Ge, захваченного ступенью. Встраивание адатома Ge в ступень характеризуется

коэффициентом $K_{st} = \exp\left(-\frac{\Delta E}{k_B T}\right)$, где ΔE – характерная энергия связи атома Ge в изломе на ступени.

На рис. 1 представлены полученные с использованием модели зависимости концентрации Ge в Si от времени роста при различных значениях энергии ΔE (рис. 1а) и различных значениях начальной концентрации адсорбированных атомов Ge, $C(0)$ (рис. 1б).

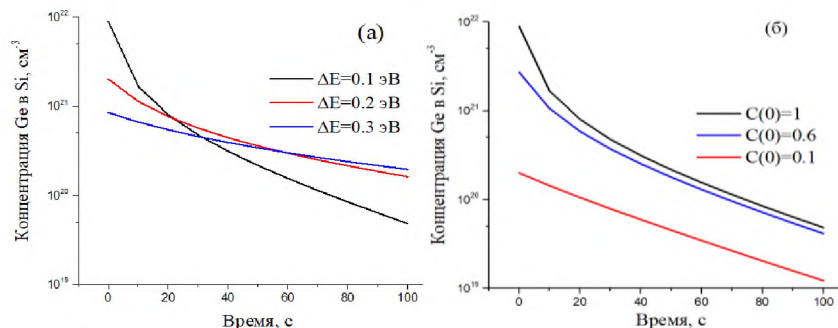


Рис. 1. Зависимость концентрации Ge в Si от времени при разных:
а – энергиях Ge в изломе; б – начальных концентрациях Ge в адслое

Как следует из результатов расчетов, представленных на рисунке, в случае малых ΔE и больших $C(0)$ кривые характеризуются наличием двух участков разного наклона, что на качественном уровне соответствует эксперименту [2]. При большой ΔE и малой $C(0)$ имеют место экспоненциальные зависимости, характерные в случае сегрегации примеси с малой начальной концентрацией в адслое. Это объясняется тем, что: при больших ΔE атомы Ge плохо встраиваются в излом и сегрегируют посредством перескока через движущуюся ступень; при малых $C(0)$, атомов в адслое и поверхностном слое недостаточно, чтобы эффект самоблокирования оказывал существенное влияние.

Литература

1. Дроздов Ю.Н. и др. Влияние упругих напряжений в подслоях на критическую толщину перехода по Странскому-Крастанову в системе GeSi/Si(001) // Поверхность. – 2009. – № 7. – С. 61–66.
2. Fukatsu S. et al. Self-limitation in the surface segregation of Ge atoms during Si molecular beam epitaxial growth // Applied Physics Letter. – 1991. – Т. 59, № 17. – С. 2103–2105.
3. Hervieu Yu. Yu. Impurity accumulation in an adsorption layer during MBE doping // Russian Microelectronics. – 2014. – Т. 43, № 8. – С. 4–10.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИХ ОСЕЙ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ОБРАЗЦА $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГОЛОГРАФИЧЕСКОЙ ИНТЕРФЕРОМЕТРИИ

А.И. Казаков, Д.С. Колесников, А. Добрянский

*Томский государственный университет
систем управления и радиоэлектроники, Томск*

E-mail: alexxxela2002ale@gmail.com

Фоторефрактивные кристаллы $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$, принадлежащие к классу силленитов, обладают высокой световой чувствительностью при сравнительно быстром отклике, вследствие чего часто используются как материалы для приложений в голографии и в голографической интерферометрии [1]. Интерферометрические системы на базе $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ обладают способностью к фазовой демодуляции лазерного излучения на высоких частотах и к подстройке под низкочастотные флуктуации внешних условий, вызываемые, например, медленными изменениями температуры – то есть обладают свойством адаптивности [1].

Исследования, проведённые на кристаллическом образце среза (110) с толщиной $d = 2,2$ мм, позволили дополнить модель фоторефрактивного эффекта механизмом, обусловленным совместным действием фотоупругого эффекта и флексогирации, и оценить величину компонент f_{1111} для тензора флексоэлектрической связи, γ_{41} – для электрогирационного тензора и сумму $\beta_{1122} + \beta_{2211}$ – для компонент флексогирационного тензора [1].

В настоящем докладе представлены результаты экспериментального исследования эффекта фазовой демодуляции на образце $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ с толщиной $d = 7,2$ мм, имеющем оптически полированные грани, перпендикулярные изначально неизвестному кристаллографическому направлению. Использование методики, описанной в работе [2], позволило для разных значений угла поворота образца вокруг нормали к полированным граням, обозначаемого в лабораторной системе координат как θ_G , измерить относительные амплитуды гармоник выходного сигнала фазовой демодуляции на частотах Ω и 2Ω , где Ω – частота фазовой модуляции, и оценить значения соответствующих коэффициентов связи Γ , определяемых следующим соотношением:

$$\Gamma = -\frac{2}{d} \ln \left(1 + \frac{M_2^m}{4J_0(\varphi_m)J_2(\varphi_m)} \right). \quad (1)$$

Здесь M_2^m – относительная амплитуда второй гармоники в выходном сигнале демодуляции, J_n – функция Бесселя n -го порядка, ϕ_m – амплитуда фазовой модуляции сигнального пучка.

Зависимость Γ от угла θ_G показана на рис. 1. Было обнаружено, что амплитуда первой гармоники в выходном сигнале превосходит ее значение для второй гармоники, что может свидетельствовать о том, что нормаль ко входной грани кристалла коллинеарна кристаллографическому направлению [001]. Точки экстремума в зависимости Γ соответствуют положениям, в которых вектор решётки совпадает с осями [100], [010] кристалла или с направлениями, им противоположными.

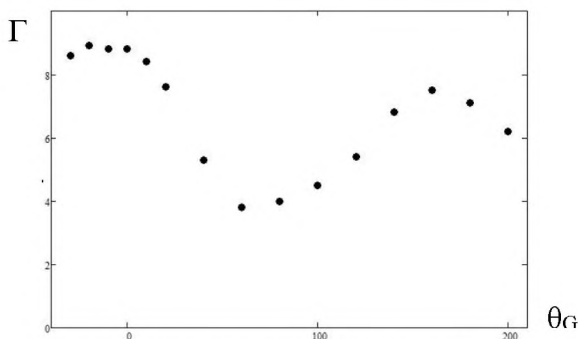


Рис 1. Зависимость коэффициента связи Γ от ориентации кристалла относительно вектора фоторефрактивной решетки

Таким образом, можно сделать вывод, что кристаллографическая ось [001] совпадает с нормалью ко входной грани, а осям [100], [010] соответствуют положения $\theta_G = -15^\circ$ и $\theta_G = 75^\circ$.

Литература

1. Шандаров С. М. и др. Определение материальных параметров фоторефрактивных кристаллов на основе метода адаптивной голографической интерферометрии // Оптика и спектроскопия. – 2021. – Т. 129, № 4. – С. 413–417.
2. Колесников Д.С. Адаптивный голографический интерферометр, использующий попутное двухволновое взаимодействие в силикате висмута / Д.С. Колесников // Научная сессия ТУСУР–2023: матер. междунар. науч.-техн. конф. студентов, аспирантов и молодых ученых, Томск, 17–19 мая 2023 г.: в 3 ч. – Томск: В-Спектр, 2023. – Ч. 1. – 320 с.

ВЛИЯНИЕ ЛАЗЕРНОЙ ЗАКАЛКИ ПОВЕРХНОСТИ МОНОКРИСТАЛЛОВ ZnGeP_2 НА ПОРОГ ОПТИЧЕСКОГО ПРОБОЯ

А.Ю. Кальсин, А.Б. Лысенко, А.Ш. Габдрахманов

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: andrejkalsin@gmail.com

Уже долгое время монокристаллы ZnGeP_2 являются важной составляющей параметрических генераторов света, преобразующих излучение 2,1 мкм в перестраиваемое в спектре от 3 до 8 мкм. [1] Главным ограничением для максимально эффективной генерации излучения выступает эффект оптического пробоя, приводящий к повреждению материала при повышении плотности мощности. Пробой провоцируется в первую очередь дефектами поверхности, возникающими при шлифовке, полировке, а также выходом объемных дефектов кристаллической структуры на поверхность и наличием примесных атомов в материале [2]. Улучшение качества поверхности материала достижимо различными технологическими методами обработки.

В данной работе было проведено исследование влияния процесса лазерной закалки поверхности монокристаллов ZnGeP_2 на порог оптического пробоя. Предполагалось, что подобное воздействие приведет к релаксации механических напряжений и дефектов, вызванных выходом объемных дефектов на поверхность. Ожидается, что это исследование будет способствовать повышению устойчивости монокристаллов ZnGeP_2 к лазерно-индуцированному повреждению.

Исследуемые образцы ZnGeP_2 представляли собой пластины высотой 3 мм и габаритами 10×10 мм, вырезанных перпендикулярно направлению роста кристалла из материала, прошедшего стандартную обработку. (Синтез материала, рост по вертикальному методу Бриджмена, отжиг выращенного кристалла, резка на пластины).

Для исследования порога оптического пробоя использовался Ho:YAG лазер, генерирующий излучение на длине волны 2,097 мкм с накачкой непрерывным тулиевым волоконным лазером.

Порог оптического пробоя образцов вычислялся с помощью методики R-on-1.

Были проведены работы по оптимизации частотно-энергетических характеристик лазерного источника с целью определения наиболее оптимального режима лазерной закалки полированной поверхности. Проводились эксперименты по оптимизации частоты следования импульсов,

средней мощности падающего излучения, а также скорости сканирования поверхности лазерным пучком.

Результаты первого эксперимента показали, что увеличение частоты следования импульсов сканирующего излучения положительно сказывается на уменьшении вероятности оптического пробоя для обработанных образцов. Поэтому для дальнейших экспериментов задавалась частота в 80 кГц.

Далее осуществлялось изменение средней мощности лазера с целью определить режим, позволяющий не вызвать абляцию материала на полированной поверхности, но при этом провести закалку и даже микроплавление приповерхностного слоя.

Поскольку профиль интенсивности пучка имеет гауссовскую форму, также проводилась оптимизация наложения пучков сканирующего лазерного излучения друг на друга с целью достигнуть более равномерную обработку поверхности.

В заключении осуществлялось изменение скорости сканирования поверхности лазерным пучком, с целью оптимизации теплового режима воздействия на поверхность.

Экспериментально подтверждено положительное влияние лазерной закалки поверхности ZGP на устойчивость к оптическому пробую и определен оптимальный частотно энергетический режим воздействия лазерного излучения с длиной волны 1,064 мкм на поверхность ZGP. Полученные в ходе эксперимента данные в дальнейшем станут основой для построения технологического процесса закалки рабочих элементов, используемых в генераторах перестраиваемого излучения ИК спектра, с целью увеличения порога оптического пробоя.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-10193, <https://rscf.ru/project/23-79-10193>.

Литература

1. Водопоьянов К.Л., Воеводин В.Г., Грибенюков А.И., Кулевский Л.А. Высокоэффективная пикосекундная параметрическая суперлюминесценция в кристалле ZnGeP₂ в диапазоне 5–6,3 мкм // Квантовая электроника. – 1987. – Т. 14, № 9. – С. 1815–1819.
2. Юдин Н.Н., Антипов О.Л., Грибенюков А.И., Еранов И.Д., Подзывалов С.Н., Зиновьев М.М., Воронин Л.А., Журавлева Е.В., Зыкова М.П. Влияние технологии постростовой обработки и параметров лазерного излучения на длинах волн 2091 и 1064 нм на порог оптического пробоя монокристалла ZnGeP₂ // Квантовая электроника. – 2021. – Т. 51, № 4. – С. 306–316.

ВЛИЯНИЕ ОТЖИГОВ НА ВЫДЕЛЕНИЕ ДИСПЕРСНЫХ ЧАСТИЦ, МИКРОСТРУКТУРУ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВЫСОКОАЗОТИСТОЙ АУСТЕНИТНОЙ СТАЛИ ВНС-53-Ш-М

А.В. Ким

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: kim.a.v@stud.tsu.ru

Высокоазотистые аустенитные стали используются в качестве конструкционных материалов и имеют преимущества перед традиционными хромоникелевыми сталями за счет более высоких прочностных свойств. Азот – элемент внедрения, увеличивающий эффективность твердорастворного механизма упрочнения и может влиять на дисперсное и другие механизмы упрочнения [1]. При температурах 700–1000°C в сталях с высоким (более 0,3 ат. %) содержанием азота происходит выделение нитридных частиц [2]. В данной работе исследуется влияние отжига при $T = 700^\circ\text{C}$ на структуру и механические свойства аустенитной стали с высоким содержанием азота.

В настоящей работе исследована стабильная высокоазотистая аустенитная сталь ВНС-53-Ш-М (07X20Г11АН6) в исходном состоянии и после отжига. Исходное состояние получено закалкой при $T = 1100^\circ\text{C}$ в течение 1 часа. После закалки образцы были отожжены при $T = 700^\circ\text{C}$ в течение 1 и 10 часов с последующим охлаждением на воздухе. После 10-часового отжига были проведены исследования структуры с помощью сканирующего электронного микроскопа высокого разрешения (СЭМ) Argeo 2 S, оснащенного полевой эмиссионной пушкой, и исследования микроструктуры с помощью просвечивающего электронного микроскопа JEOL JEM-2100 (ускоряющее напряжение 200 кВ).

Электронно-микроскопические исследования высокоазотистой аустенитной стали ВНС-53-Ш-М показали, что в исходном состоянии в стали наблюдается типичная аустенитная структура. Внутри зерен обнаружены планарные дислокационные субструктуры, дефекты упаковки, крупные двойники отжига, мелкодисперсные и грубодисперсные частицы карбонитридов типа MX (где $M = \text{Me}$, $X = \text{N, C}$). Согласно результатам микрорентгеноспектрального анализа в стали ВНС53-Ш-М грубодисперсные (размерами более 300 нм) карбонитридные частицы преимущественно содержат ванадий, ниобий, хром и молибден.

Показано, что после 10-часового отжига в стали повышается количество мелкодисперсных частиц внутри зерен и происходит выделение частиц на границах. По литературным данным и морфологии частиц [2, 3] можно сделать вывод, что в процессе отжига происходит прерывистый

распад аустенита с выделением сложных нитридов типа M_2N на основе хрома на границах зерен и некогерентных границах двойников. При этом, внутри зерен стали обнаружены мелкодисперсные частицы карбонитридов типа MX , где, согласно результатам микрорентгеноспектрального анализа, $M = Cr, Nb$, $X = N, C$.

После отжига в течение 1 часа предел прочности и предел текучести уменьшаются на ~ 30 МПа относительно исходного состояния, при этом относительное удлинение увеличивается до 50 % (таблица). Повышенная пластичность после отжига может быть связана с отпуском дислокационной субструктуры.

Механические свойства стали ВНС-53-III-M

ВНС-53-III-M	σ_B , МПа	$\sigma_{0,2}$, МПа	δ , %
Исходное состояние	954,5	614,5	35,75
700°C, 1 час	921,3	591,6	50,12
700°C, 10 часов	991,9	669,9	41,01

В результате 10-часового отжига предел текучести и предел прочности увеличиваются на $\sim 35\text{--}55$ МПа, относительное удлинение увеличилось до 41 % по сравнению с закаленным состоянием. Изменения механических свойств после 10-часового отжига связаны с осаждением частиц Cr_2N .

Автор выражает благодарность научному руководителю Литовченко И.Ю. за организацию исследовательской работы и обсуждение полученных результатов. Отдельная благодарность выражается Кушнеревой Д.С. за предоставление образцов стали для проведения исследований. Результаты получены с использованием оборудования центра коллективного пользования «Нанотех» ИФПМ СО РАН.

Литература

1. Свяжин А.Г., Капусткина Л.М. Азотистые и высокоазотистые стали. Промышленные технологии и свойства// Известия вузов. Черная металлургия. – 2019. – № 3. – С. 173–187.
2. Simmons J.W., Atteridge D.G., Rawers J.C. Sensitization of high-nitrogen austenitic stainless steels by dichromium nitride precipitation // Corrosion, 1994. – Vol. 50, № 7. – P. 491–501.
3. Vanderschaeve F., Tillard R., Foct J. Discontinuous precipitation of Cr_2N in a high nitrogen, chromium-manganese austenitic stainless steel // Journal of Materials Science. – 1995. – Vol. 30. – P. 6035–6046.

ИССЛЕДОВАНИЕ И МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РЕЗИСТИВНОГО ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ В ОКСИДНЫХ НАНОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУРАХ ТИТАНА

Е.В. Клюкина^{1,2}, А.С. Ванькаев^{1,3}

*¹Институт проблем технологии микроэлектроники
и особо чистых материалов РАН, г. Черноголовка*

*²Первый Московский государственный медицинский университет
имени И.М. Сеченова, г. Москва*

³МИРЭА – Российский технологический университет, г. Москва

E-mail: klyukina_e_v@student.sechenov.ru

Одним из наиболее перспективных вариантов компонентой базы для аналоговых нейроморфных систем является резистивная память, элементы которой представляют из себя простейшие электронные устройства, состоящие из двух металлических электродов и слоя диэлектрика между ними. Такие элементы способны изменять сопротивление при приложении напряжения, которое сохраняется и после удаления приложенного напряжения, а для восстановления значений сопротивления необходимо приложить напряжение другой полярности.

Нейроморфные вычисления, в которых электронные устройства имитируют работу биологических синапсов, в ближайшем будущем будут играть большую роль для создания новых типов компьютеров [1]. Для использования в качестве биологических синапсов, элементы резистивной памяти должны обладать многими промежуточными резистивными состояниями.

В рамках работы проводилось экспериментальное исследование плавного переключения из низкоомного в высокоомное состояние (режим Reset) в ячейках RRAM в многослойных структурах Pt/TiO₂/TiO_x с целью понимания и моделирования механизма переключения структуры и последующего моделирования.

Многослойные структуры Pt/TiO₂/TiO_x, сформированные методом магнетронного напыления, были исследованы с помощью параметрического анализатора Keithley 4200A-SCS. Измеренные вольт-амперные характеристики представлены на рис. 1а. Основной особенностью, позволившей достичь более пяти резистивных состояний, был «плавный» Reset. Для его объяснения была разработана гипотеза о наличии множества параллельно включенных проводящих филаментов.

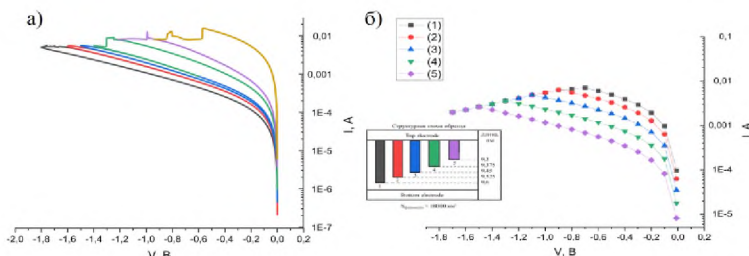


Рис. 1. Экспериментальная (а) и теоретическая (б) ВАХ ячейки RRAM TiO_x

В рамках модели предполагается, что филамент представляет собой проводящую структуру, а туннельный ток [2] протекает через диэлектрический зазор между филаментом и нижним электродом. В случае, если в ячейке памяти в процессе переключения из низкоомного в высокоомное состояние (режим Set) образуется несколько филаментов сравнимых по длине, то в процессе Reset происходит их последовательное окисление, что обеспечивает плавный характер переключения. На рис. 1 б представлена расчетная вольт-амперная характеристика, полученная в рамках разработанной модели.

Эффект плавного Reset позволяет ячейке RRAM работать в аналоговом режиме с большим количеством промежуточных высокоомных состояний, что позволяет использовать RRAM для создания аналоговых нейроморфных систем.

Авторы выражают благодарность научному руководителю Ковешникову Сергею Викторовичу за организацию исследовательской работы и обсуждение полученных результатов. Результаты получены на базе ИПТМ РАН, г. Черноголовка.

Литература

1. Yang J.J., etc. Memristive devices for computing // Nat. Nanotechnol. – 2012. – Vol. 8, № 1. – P. 13–24.
2. Simmons J.G. Generalized Formula for the Electric Tunnel Effect between Similar Electrodes Separated by a Thin Insulating Film // Journal of Applied Physics. – 1963. – Vol. 34, № 6. – P. 1793–1803.

**ИССЛЕДОВАНИЕ СОПРОТИВЛЕНИЯ ЦИКЛИЧЕСКИМ
ДЕФОРМАЦИЯМ МОНОКРИСТАЛЛОВ
ВЫСОКОЭНТРОПИЙНОГО СПЛАВА (TiZrHf)₅₀Ni₂₅Co₁₀Cu₁₅
ПРИ 448 К**

Д.А. Куксгаузен

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: kuksgauzen90@gmail.com

Разработка новых высокоэнтропийных сплавов (TiZrHf)₅₀Ni₂₅Co₁₀Cu₁₅ (ат. %) с высокими прочностными свойствами высокотемпературной фазы (предел текучести $\sigma_{0.1} \geq G/100$, G – модуль сдвига) и высокотемпературной сверхэластичностью при $T > 373$ К представляет большой научный и практический интерес. Для практического использования этих сплавов в высокотемпературных условиях необходимы исследования развития обратимых мартенситных превращений (МП) при высоких температурах испытания при $T > 373$ К.

В работе исследовали монокристаллы сплава (TiZrHf)₅₀Ni₂₅Co₁₀Cu₁₅ (ат. %), который испытывает термоупругие МП из высокотемпературной B2-фазы в моноклинный B19'-мартенсит [1].

Монокристаллы выращивали методом Бриджмена из заготовок, которые получали электродуговой плавкой из чистых элементов. Сверхэластичность исследовали при деформации сжатием на кристаллах с осью сжатия вдоль [011]-направления после гомогенизации и закалки в воду. Испытания по циклическим деформациям проводили на универсальной испытательной установке Инстрон 5969. Температуры МП определяли по температурной зависимости электрического сопротивления $\rho(T)$.

Установлено, что температуры начала M_s и конца M_f прямого МП равны 404 К и 250 К, соответственно. Температуры начала A_s и конца A_f обратного МП составили 278 К и 435 К, соответственно.

На рис. 1 представлены результаты исследования циклических деформаций до 30 циклов нагрузки/разгрузки при $T=448$ К до различной величины заданной деформации ε_{tr} равной 1 % (рис. 1а) и 3.5 % (рис. 1б) и зависимость напряжений начала МП под нагрузкой $\sigma_{0.1}$ от количества циклов n для двух значений ε_{tr} (рис. 1в).

Показано, что при заданной деформации до $\varepsilon_{tr} \sim 1$ % в 30 циклах нагрузка/разгрузка, во-первых, не наблюдается появление необратимой деформации ε_{ir} . Во-вторых, напряжения $\sigma_{0.1}$ не зависят от количества циклов n . Эти результаты свидетельствуют о том, что не обнаружена деградация эффекта сверхэластичности.

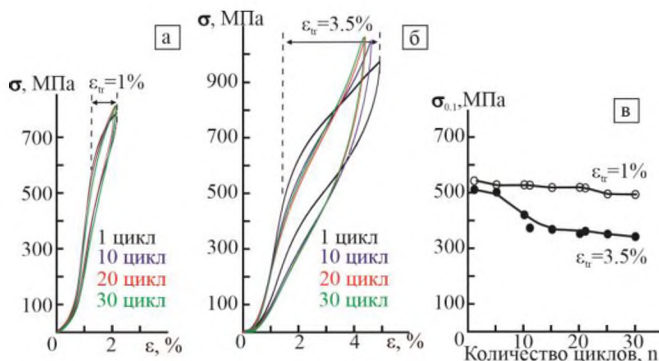


Рис. 1. Циклическая стабильность сверхэластичности в [011]-монокристаллах сплава $(\text{TiZrHf})_{50}\text{Ni}_{25}\text{Co}_{10}\text{Cu}_{15}$ при деформации сжатием при $T = 448 \text{ K}$ до 30 циклов нагрузки/разгрузки: а – при заданной деформации до $\varepsilon_{tr} = 1\%$; б – при заданной деформации до $\varepsilon_{tr} = 3.5\%$; в – зависимость напряжений начала МП $\sigma_{0.1}$ от количества циклов n для двух значений ε_{tr}

Циклирование до $\varepsilon_{tr} = 3.5\%$ при n от 1 до 15 приводит к уменьшению $\sigma_{0.1}$ от 510 до 380 МПа. При $n > 15$ $\sigma_{0.1}$ изменяются незначительно. Следовательно, деградация сверхэластичности зависит от количества циклов и при $n < 15$ наблюдается изменение вида петли сверхэластичности.

Итак, впервые показано, что [011]-кристаллы высокоэнтропийного сплава $(\text{TiZrHf})_{50}\text{Ni}_{25}\text{Co}_{10}\text{Cu}_{15}$ характеризуются высоким сопротивлением деградации сверхэластичности при высоких температурах испытания $T = 448 \text{ K}$ и эти материалы могут использоваться как высокотемпературные демпферы.

Автор выражает благодарность научному руководителю Чумлякову Ю.И. за организацию исследовательской работы и обсуждение полученных результатов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ в рамках научного проекта № 22-19-00017.

Литература

1. Chumlyakov Y.I., Kireeva I.V., Yakovleva L.P., Vyrodova A.V., Kuksgauzen I.V. High-temperature superelasticity and shape memory effect in [011]B2-oriented single crystals of the $(\text{TiZrHf})_{50}\text{Ni}_{25}\text{Cu}_{15}\text{Co}_{10}$ high-entropy alloy // Materials Letters. – 2023. – Vol. 330, № 133274.

МОДИФИКАЦИЯ СТРУКТУРЫ И ЕЁ ВЛИЯНИЕ НА СВЕРХЭЛАСТИЧНОСТЬ И ЭЛАСТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В ПОЛИКРИСТАЛЛАХ СПЛАВА $\text{Ni}_{54}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27}$

И.Д. Курлевская, А.Б. Тохметова

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: kurl.irina@yandex.ru

Актуальной задачей является исследование и разработка материалов с эластокалорическим эффектом (ЭКЭ) для твердотельного охлаждения. На монокристаллах сплава Гейслера NiFeGa с термоупругими $\text{L}_{21}(\text{B}2)$ - $10\text{M}/14\text{M-L}_{10}$ мартенситными превращениями (МП) получен ЭКЭ 6–13 К в интервале температур до 200 К (при сжатии) [1, 2]. Широкое практическое применение поликристаллических материалов затруднено в связи с хрупким разрушением по границам зёрен. Повышение пластичности сплавов Гейслера возможно за счёт выделения γ -фазы, микролегирования бором либо формирования благоприятной текстуры. Однако систематических исследований влияния данных подходов на структуру и ЭКЭ в сплавах NiFeGa проведено не было. Поэтому целью работы является исследование различных структурных состояний поликристаллов $\text{Ni}_{54}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27}$ для достижения оптимальных параметров МП и ЭКЭ.

Поликристаллы сплава $\text{Ni}_{54}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27}$ получены методом дуговой плавки (NFG_1). Для получения двухфазной ($\beta + \gamma$)-структуры были проведены высокотемпературные отжики при $T = 1273 \text{ K}$ (NFG_2) и $T = 1448 \text{ K}$ (NFG_3) в течение 0,5 часа с последующей закалкой в воду. Бор (0,3 ат. %) введён в сплав в виде аморфного порошка бора, завёрнутого в фольгу никеля (NFGB). Направленная кристаллизация (NFG_нк) выполнена с использованием метода Бриджмена.

Средний размер зерна для каждого состояния приведён в таблице. После отжигов формируется двухфазная ($\beta + \gamma$) структура: при повышении температуры отжига происходит утолщение прослойки γ -фазы по границам зерен и укрупнение частиц в объеме зерна. Микролегирование бором 0,3 ат. % приводит к измельчению зерна в 2,5 раза и формированию малой объемной доли ($< 4 \%$) вторичных фаз (преимущественно боридов никеля). После направленной кристаллизации формируются крупные зерна размером 1–4 мм и текстура $\langle 012 \rangle$. Соответствующие температуры МП M_s и A_f также приведены в таблице.

Характеристики микроструктуры, МП и ЭКЭ в поликристаллах NiFeGa(B) в различных структурных состояниях

Состояние	Размер зерна, мкм	γ -фаза	M_s , К	A_f , К	ΔT_{ad} , К
NFG_1	132	-	284	296	4,4
NFG_2		+	263	274	3,0
NFG_3		+	317	327	2,7
NFGB	51	+	245	259	5,1
NFG_нк	1000–4000	-	269	276	6,3

Циклическая стабильность СЭ и ЭКЭ исследовалась в 100 циклах нагрузка/разгрузка. Зависимость $\sigma(\epsilon)$ становится стабильна после 20 циклов во всех состояниях, кроме NFGB, где стабилизация происходит уже к 3 циклу. Как видно из таблицы, наибольшие значения величины адиабатического охлаждения ΔT_{ad} получены в состояниях NFGB и NFG_нк.

После циклических испытаний трещины были обнаружены в состояниях NFG_1 и NFG_нк. В состояниях NFG_2 и NFG_3 за счет упругой и пластической деформации прослойки γ -фазы вдоль границ зернограничного разрушения не происходит. Отсутствие трещин в состоянии NFGB объясняется усилением границ зерен, выделением частиц и измельчением зерна в результате микролегирования бором.

Таким образом, показано, что оптимальное двухфазное состояние формируется после отжига при $T = 1273$ К, позволяющего создать тонкую прослойку γ -фазы, что повышает пластичность, и получить ЭКЭ величиной до 3 К. Микролегирование бором одновременно с повышением пластичности приводит к значительному ЭКЭ величиной до 5,1 К. Направленная кристаллизация за счёт формирования текстуры позволяет добиться наибольшего ЭКЭ ($\Delta T_{ad} = 6,3$ К).

Авторы выражают благодарность Панченко Е.Ю., Чумлякову Ю.И. за организацию исследовательской работы и обсуждение полученных результатов. Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 23-19-00150.

Литература

1. Wu Y. [et al.] Elastocaloric cooling capacity of shape memory alloys. Role of deformation temperatures, mechanical cycling, stress hysteresis and inhomogeneity of transformation // *Acta Mater.* – 2017. – Vol. 135. – P. 158–176.
2. Eftifeeva A. [et al.] Superelasticity and elastocaloric cooling capacity in stress-induced martensite aged [001]_A-oriented Ni₅₄Fe₁₉Ga₂₇ single crystals // *Materials Science and Engineering A.* – 2022. – Vol. 855. – P. 143855.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК НОРМАЛЬНО ЗАКРЫТОГО AlGa_N/Ga_N HEMT В ПАКЕТЕ SENTAURUS TCAD

К.Н. Курчин

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: kurchin.konstantin@yandex.ru

Транзисторы с высокой подвижностью электронов (HEMT) на основе GaN продемонстрировали превосходные свойства (напряжение пробоя, подвижность носителей заряда, теплопроводность и др.) относительно GaAs и Si [1], что делает этот материал предпочтительным для применения в высокомоощных и высокочастотных устройствах [2]. Однако процесс переноса заряда может иметь сложный характер, сопровождающийся различными паразитными эффектами, оказывающими негативное влияние на характеристики устройства. Для минимизации этих эффектов прибегают к модификации структуры транзистора. Целью этой работы являлось моделирование HEMT транзистора с 2DEG возле гетероперехода и получение его выходных характеристик.

Разрыв энергетических зон на границе раздела двух материалов с разными ширинами запрещённой зоны может привести к тому, что зона проводимости окажется ниже уровня Ферми в узкозонном материале. Это объясняет возникновение квантовой ямы у границы раздела, которая HEMT играет роль проводящего канала. Так как формирование канала происходит даже при отсутствии каких-либо примесей, электроны в нём обладают большей подвижностью, однако движение их ограничено двумя степенями свободы (образуется двумерный электронный газ, 2DEG). Чтобы получить нормально закрытый транзистор, под затвором размещается легированный акцепторной примесью слой, истощающий область канала под затвором.

В данной работе моделировался AlGa_N/Ga_N HEMT со следующей гетероструктурой: p-GaN – 100 нм, барьерный слой Al_{0.25}Ga_{0.75}N – 20 нм, спейсер AlN – 1 нм, канал GaN – 300 нм, буферный слой GaN – 4 мкм p-GaN легирован Mg-примесью с концентрацией $3 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, в GaN-буфере C-примесь $5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Все контакты сделаны из Ti, область между контактами заполнена пассивирующим слоем SiO₂.

Моделирование проводилось в программном пакете Sientaurus TCAD. Учитывалась пьезоэлектрическая поляризация на границе раздела AlGa_N/Ga_N. Для описания переноса заряда в транзисторе была выбрана дрейфово-диффузионная модель, в которой решается система уравнений непрерывности электронов и дырок с уравнением Пуассона, так как она представляет собой компромисс между точностью и быстротой вычисле-

ний. Для расчёта подвижностей носителей заряда использовалась модель рассеяния на атомах примеси и модель насыщения дрейфовой скорости. Для описания рекомбинации использовалась модель Шокли–Рида–Холла. Температурные эффекты не учитывались. Полученные в результате моделирования выходные характеристики изображены на рис. 1.

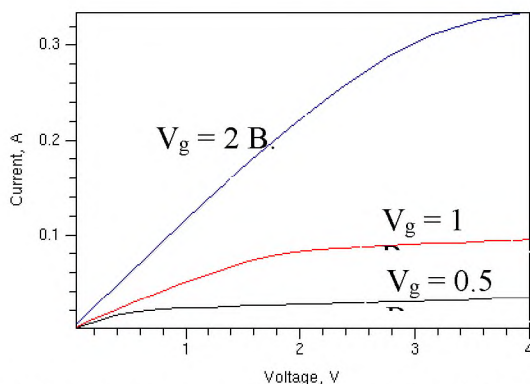


Рис. 1. Вольт-амперные характеристики AlGaIn/GaN HEMT при разных напряжениях на затворе

Полученные выходные характеристики качественно согласуются с теорией, а значения тока насыщения одного порядка с экспериментальными данными [3]. Вследствие пьезоэлектрической поляризации на границе раздела AlGaIn/GaN был образован 2DEG, через который протекает постоянный ток, а величина тока насыщения регулируется напряжением на затворе.

Литература

1. Ozgur A., Kim W., Fan Z., Botchkarev A., Salvador A., Mohammad S.N., Sverdlov B., Morkoc H. Electron. Lett. 31, 1389 (1995).
2. Drozdovski NV, Caverly RH. GaN-based high electron mobility transistors for microwave and RF control applications // IEEE Trans Microw Theor Tech. – 2002. – Vol. 50, № 1. – P. 4–8.
3. Hilt O., Knauer A., Brunner F., Bahat-Treidel E. Normally-off AlGaIn/GaN HFET with p-type Ga Gate and AlGaIn buffer. In Proceedings of the 6th International Conference on Integrated Power Electronic Systems (CIPS 2010). – 2010. – P. 185–188.

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОННО- И ИОННО-ПУЧКОВЫХ ОБРАБОТОК НА ДЕФОРМАЦИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ СПЛАВА TiNi ПРИ НАГРУЖЕНИЯХ КРУЧЕНИЕМ

В.В. Лобань, Д.В. Чепелев

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: slavalob357@gmail.com

Сплавы на основе никелида титана (сплавы TiNi) проявляют уникальные свойства – эффекты памяти формы и сверхэластичности (ЭПФ-СЭ), что делает их особенно важными и необходимыми для использования в медицине [1]. Модифицировать поверхность сплавов TiNi, без критического влияния на интегральные физико-механические характеристики, можно с использованием аддитивного тонкопленочного электронно-пучкового способа синтеза поверхностных сплавов (ПС) на основе систем из Ti, Ni и Ta [2]. Тем не менее, важно установить, какие изменения неупругих свойств (ЭПФ-СЭ) сплава TiNi происходят при испытаниях на кручение. Цель работы – исследовать деформационное поведение сплава TiNi после электронно- и ионно-пучковых обработок при нагружениях кручением.

Образцы изготовлены из сплава TiNi марки ТН-1, полученного методом вакуумной индукционной плавки в печи с графитовым тиглем (ООО «Промышленный центр МАТЭК-СПФ», Россия, Москва). Состав сплава: Ti (баланс)-55.75 Ni-0.035 O-0.02 C-0.003 N-0.001 H (вес. %). В работе исследованы TiNi-образцы в форме прямоугольных параллелепипедов (1×1×25 мм), которые были вырезаны методом электроэрозионной резки из горячекатаного листового проката.

Электронно-пучковую обработку поверхности TiNi-образцов проводили низкоэнергетическим сильноточным электронным пучком (НСЭП) на установке «МикрЭп» (ИСЭ СО РАН, Россия) в режиме: плотность энергии $E_s = 3.7$ Дж/см², количество импульсов $n = 10$. Ионно-пучковую обработку поверхности TiNi-образцов выполняли с применением вакуумно-дугового частотно-импульсного ионного источника «ДИАНА» и катода из тантала марки ТВЧ чистотой 99.7 масс.% (ООО «Гирмет», Россия) в режиме: доза облучения $D = 1.0 \cdot 10^{18}$ см⁻², ускоряющее напряжение $U = 80$ кэВ.

Испытания на кручение проводили на машине «НДВ-100» (ООО «Метротест», Россия) в соответствии ГОСТ 3565–80. Длина рабочей части образцов ~ 50 мм. Цикл испытаний включал (1) нагружение образца кручением вокруг его оси с постоянной скоростью 4 %/мин до величины деформации $\gamma_{max} = 4$ %; (2) с такой же скоростью вращения в противоположном направлении снимали нагрузку до нуля. Количество цик-

лов испытаний N составляло 20. Верхний предел измерений крутящего момента силы (датчик крутящего момента) составлял 10 Н*м. Испытания проводили при температуре 298 ± 1 К. Накапливаемую и возвращаемую деформацию фиксировали в виде кривых «момент силы M – угол закручивания ϕ », которые далее перестраивали в зависимости «напряжение сдвига τ – деформация кручения γ ». На каждый тип обработки к испытаниям на кручение подвергали по 3 образца.

По экспериментальным данным (диаграммам τ – γ) определяли напряжение начала накопления мартенситной деформации (τ_M), механический гистерезис напряжения ($\Delta\tau$), величины неупругой деформации, накопленной при нагружении ($\gamma_{1 \rightarrow 2}$) и возвращенной при разгрузке ($\gamma_{3 \rightarrow 4}$), и величину пластической деформации ($\gamma_{\text{пласт}}$), накапливаемой после каждого цикла испытаний. Далее строили зависимости этих параметров от цикла «нагружения-разгрузки» N . Обработку и построение зависимостей проводили с использованием программно-вычислительных комплексов Mathcad и Origin.

Выполнены исследования влияния электронно- и ионно-пучковых обработок на деформационное поведение сплава TiNi при нагружениях кручением, проанализированы экспериментальные данные. Обнаружено, что влияние электронно- и ионно-пучковых обработок не оказывает критического влияния на интегральные неупругие свойства сплава TiNi. Последующее нагревание модифицированных образцов из сплава TiNi до $T \cong 323$ К после окончания циклических испытаний приводит к полному возврату накопленной деформации.

Авторы выражают благодарность научным сотрудникам ЛМПиН ИФПМ СО РАН г.н.с., д.ф.-м.н., профессору Мейснер Л.Л. и н.с., к.т.н. Дьяченко Ф.А. за организацию исследовательской работы и обсуждение полученных результатов. Исследования выполнены в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, проект FWRW-2021-0003.

Литература

1. Mohd J.J., Leary M., Subic A., Gibson A.M. A review of shape memory alloy research, applications and opportunities // Materials & Design. – 2014. – Vol. 56. – P. 1078–1113.
2. Дьяченко Ф.А., Мейснер Л.Л., Шугуров А.Р., Нейман А.А., Семин В.О., Атоуллаева А.А. Механические свойства поверхностных Ti–Ni–Ta- и Ti–Ni–Ta–Si-сплавов, синтезированных на подложках из никелида титана // Журнал технической физики. – 2021. – Т. 91, № 1. – С. 51–57.

О ПРОБЛЕМЕ АНАЛИЗА ЛОКАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ БИНАРНЫХ НАНОЧАСТИЦ Ti-V

Г.Д. Ломоносов, Я.П. Савельев, Д.Р. Зорин

Тверской государственный университет, Тверь

E-mail: nsdobnyakov@mail.ru

Современные экспериментальные методы, применяемые для изучения структуры наночастиц являются трудоемкими и финансовозатратными. Именно поэтому развитие методов компьютерного моделирования [1] и программных средств для изучения локальной структуры наночастиц [2] приобретают особую значимость. В [3] подробно анализируются преимущества и недостатки двух основных методов изучения локальной структуры наночастиц: метода анализа ближайших соседей (CNA, common neighbor analysis) и метода полиэдрических шаблонов (PTM, polyhedral template matching). Однако, существуют бинарные наночастицы [1], для которых необходим прецизионный подбор параметров моделирования для получения кристаллических локальных структур в процессе охлаждения. Типичным примером таких бинарных наночастиц является сплав Ti-V. Наши результаты говорят о том, что с одной стороны, это может быть объяснено тем, что нестабильность характерна для бинарных наночастиц Ti-V, что подтверждается данными для макроскопических сплавов. С другой стороны, важно корректно проводить идентификацию локальных структур в бинарных наночастицах Ti-V для изучения закономерностей и механизмов структурных изменений в процессе термического воздействия.

Авторы благодарят своего научного руководителя к.ф.-м.н. Сдобнякова Н.Ю. за организацию исследовательской работы и обсуждение полученных результатов.

Литература

1. Богданов С.С., Сдобняков Н.Ю. Закономерности структурообразования в бинарных наночастицах ГЦК металлов при термическом воздействии: атомистическое моделирование. – Тверь: Изд-во ТвГУ, 2023. – 144 с.
2. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool // Modell. Simul. Mater. Sci. Eng. – 2010. – Vol. 18. – Art. № 015012. – 7 p.
3. Polak W.Z. Efficiency in identification of internal structure in simulated monoatomic clusters: Comparison between common neighbor analysis and coordination polyhedron method // Computational Materials Science. – 2022. – Vol. 201. – Art. № 110882. – 8 p.

ВЛИЯНИЕ ЛЕГИРОВАНИЯ ХАЛЬКОГЕНАМИ Se, Te НА ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДИФОСИДА ЦИНКА-ГЕРМАНИЯ

А.Б. Лысенко, Е.С. Слюнько, А.Ю. Кальсин

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: festality@yandex.ru

Монокристаллы дифосфида цинка-германия (ZnGeP_2 или ZGP) представляют собой уникальную нелинейную среду для параметрического преобразования частоты оптического излучения в среднем инфракрасном (ИК) диапазоне, обладающую высоким нелинейно-оптическим качеством [1].

Целью данной работы является модификация и улучшение оптических свойств ZGP для расширения области его применения.

На основании анализа литературных данных было принято решение легировать ZGP халькогенами, а именно – селеном и теллуром [2].

Диффузионное легирование Se проводилось с помощью напыления на поверхность полированных пластинок ZGP с последующим отжигом в вакууме при температуре 650°C и 750°C.

В качестве легирующей примеси для эксперимента по объемному легированию был выбран теллур. Навеска теллура составляла 3 % масс. от общей массы синтезируемого вещества. Монокристалл выращивался в трубчатой печи вертикального оформления на затравку. Для определения пропускания и порога оптического пробоя легированного Te монокристалла ZGP были вырезаны две пластинки. Пластинки были отшлифованы, затем отполированы.

Измерения пропускания и оптической прочности образцов проводились на длине волны падающего излучения 2.1 мкм. [1].

Диффузионное легирование Se показало хорошие результаты, порог пробоя увеличился с 2,26 Дж/см² до 2,64 при легировании Se при температуре 650°C и до 2,7 Дж/см² при легировании Se при 750°C [3]. Примесь Te благотворно повлияла на пропускание в ИК области спектра. На рис. 1 приводится сравнительный график зависимости вероятности пробоя от мощности падающего излучения легированного Te и чистого ZGP.

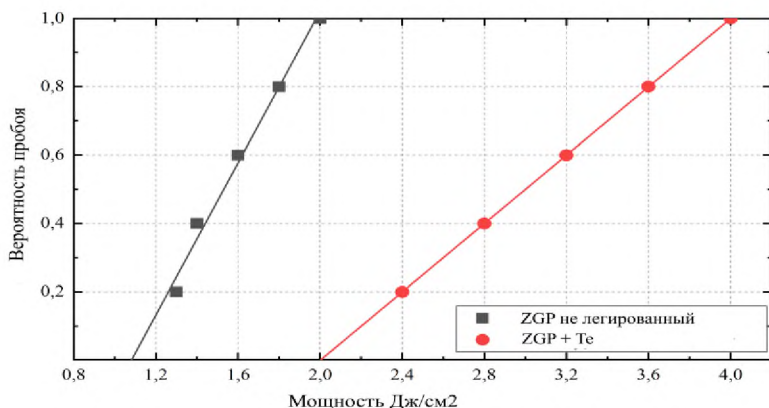


Рис. 1. Сравнительные графики зависимости вероятности пробоя от мощности падающего излучения легированного Te и чистого ZGP

В результате легирования ZGP теллуром, так же удалось добиться улучшения оптических характеристик. Пропускание увеличилось на 10 % по сравнению с не легированным и не отожженным материалом, а лучевая прочность увеличилась на 70 %, как видно из рисунка.

Авторы выражают благодарность научному руководителю, кандидату физ-мат. наук, Юдину Н.Н. за помощь в подготовке и проведении исследования.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-10193, <https://rscf.ru/project/23-79-10193.%22>

Литература

1. Yudin N., Antipov O., Eranov I., Gripenyukov A., Verozubova G., Lei Z., Zinoviev M.; Podzvalov S., Slyunko E., Voevodin V., Laser-Induced Damage Threshold of Single Crystal ZnGeP₂ at 2.1 μm : The Effect of Crystal Lattice Quality at Various Pulse Widths and Repetition Rates // Crystals. – 2022. – Vol. 12. – P. 652.
2. Грудинкин С.А., Бахарев В.И., Егоров В.М., Мелех Б.Т., Голубев В.Г. Кристаллизационная способность, оптические и электрические свойства халькогенидных стеклообразных полупроводников Ge₁₀(Se–Te)₉₀ и Ge₃₀(Se–Te)₇₀ // Физика и техника полупроводников. – 2011. – Т. 45, вып. 11. – С. 1520–1524.
3. Yudin N., Zinoviev M., Kuznetsov V., Slyunko E., Podzvalov S., Voevodin V., Ly-senko A., Kalsin A., Shaimerdenova L., Baalbaki H. Effect of Dopants on Laser-Induced Damage Threshold of ZnGeP₂ // Crystals. – 2023. – Vol. 13, № 3. – P. 440.

МИКРОСТРУКТУРА И МИКРОТВЕРДОСТЬ ИНТЕРМЕТАЛЛИДНОГО МАТЕРИАЛА СИСТЕМЫ Ni-Cr-Al, ПОЛУЧЕННОГО МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОГО АДДИТИВНОГО ПРОИЗВОДСТВА

М.А. Лысунец¹, Д.О. Астапов^{2,3}

¹*Национальный исследовательский*

Томский политехнический университет, Томск

²*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

³*Национальный исследовательский*

Томский государственный университет, Томск

E-mail: mal27@tpu.ru

Электронно-лучевое аддитивное производство (ЭЛАП) – это современный, перспективный метод изготовления различных изделий из металлов и сплавов. Данный способ имеет ряд преимуществ: высокая скорость изготовления деталей/изделий заданной формы, малое количество отходов при их механической обработке, получение деталей сложной формы. Интерметаллидные соединения особенно востребованы в авиакосмической отрасли ввиду их низкой плотности и высокой твердости [1]. ЭЛАП-процесс упрощает работу с данными сплавами – позволяет избежать их дополнительной механической обработки, что является еще одним его преимуществом. Цель работы – выявить особенности микроструктуры и определить микротвердость интерметаллидных материалов, полученных методом ЭЛАП при использовании промышленных проволок NiCr и Al.

Заготовки получены методом ЭЛАП с использованием лабораторного оборудования и программного обеспечения, разработанного в ИФПМ СО РАН. В процессе аддитивного производства производилась подача промышленных проволок NiCr и Al в разных соотношениях: 3:1 (далее – 3NiCr+Al) и 1:1 (NiCr+Al). Химический состав проволок приведён в работе [2]. Исследования проводились на образцах, вырезанных из центральной части полученной таким образом заготовки, чтобы избежать влияния подложки (аустенитная нержавеющая сталь (Fe, 18%Cr, 8%Ni, 0,1%C)) на свойства получаемого интерметаллидного материала. Образцы были механически отшлифованы и отполированы. Более подробно метод получения образцов описан в работе [3]. Микроструктуру исследовали с помощью светового микроскопа Altami MET 1C и растрового электронного микроскопа LEO EVO 50 (РЭМ). Микротвердость измеряли методом Виккерса на микротвердомере AFFRI DM8 с нагрузкой на индентор 100 г.

Анализ микроструктуры показал, что оба образца $3\text{NiCr}+\text{Al}$ и $\text{NiCr}+\text{Al}$ имеют дендритную микроструктуру. При этом микроструктура дендритов в образцах различна. Образец $\text{NiCr}+\text{Al}$ имеет более длинные и узкие дендритные ветви, междендритные прослойки негомогенны. При анализе полученной микроструктуры образца $\text{NiCr}+\text{Al}$ выявлено, что объем дендритной фазы составляет 87,4 %, что больше объема дендритной фазы в образцах $3\text{NiCr}+\text{Al}$ (62,9 %). Морфологические особенности структуры сплава $\text{NiCr}+\text{Al}$ указывают на формирование структуры на основе $\gamma\text{-Ni}$ и Ni_3Al фаз. В сплаве $3\text{NiCr}+\text{Al}$ междендритные прослойки однородны, но межфазные границы «дендрит/междендрит» не гладкие, а «зубчатые». Образец $3\text{NiCr}+\text{Al}$ – интерметаллический сплав, который имеет сложный состав на основе фаз Ni_3Al , Ni_3Cr и NiAl [2].

Среднее значение микротвердости образца $\text{NiCr}+\text{Al}$ составляет 5,1 ГПа. Она выше микротвердости образца $3\text{NiCr}+\text{Al}$ (4,3 ГПа). Микротвердость обоих образцов незначительно возрастает по мере приближения к верхней части заготовки.

Таким образом, с помощью метода электронно-лучевого аддитивного производства были получены образцы двух интерметаллидных сплавов с разным соотношением компонент NiCr и Al . Установлено, что сплавы имеют различную структуру и микротвердость. Это обусловлено различием в их фазовом составе.

Исследование проведено в рамках проекта государственного задания FWRW-2022-0005. Результаты получены с использованием оборудования ЦКП «Нанотех» ИФГМ СО РАН. Авторы выражают благодарность научному руководителю д.ф.-м.н. Е.Г. Астафуровой, а также д.т.н. Е.А. Колубаеву, к.ф.-м.н. В.Е. Рубцову и к.ф.-м.н. С.Ю. Никонову за помощь в проведении исследования.

Литература

1. Каблов Е.Н., Оспенникова О.Г., Ломберг Б.С. Стратегические направления развития конструкционных материалов и технологий их переработки для авиационных двигателей настоящего и будущего // Автоматическая сварка. – 2013. – № 10–11. – С. 23–32.
2. Astafurova E.G., Reunova K.A., Zagibalova E.A., et al Microstructure, phase composition, and mechanical properties of intermetallic Ni-Al-Cr material produced by dual-wire electron-beam additive manufacturing // Metals. – 2024. – Vol. 14 – P. 75.
3. Kolubaev E.A., Rubtsov V.E., Chumaevsky A.V., Astafurova E.G. Micro-, Meso- and Macrostructural Design of Bulk Metallic and Polymetallic Materials by Wire-Feed Electron-Beam Additive Manufacturing // Phys. Mesomech. – 2022. – Vol. 25. – P. 479–491.

ПЕРИОДИЧЕСКАЯ РЕНУКЛЕАЦИЯ КАК ПОДХОД К УЛУЧШЕНИЮ ТРИБОЛОГИЧЕСКИХ СВОЙСТВ CVD АЛМАЗНЫХ ПОКРЫТИЙ

А.С. Митулинский, В.А. Булах

*Национальный исследовательский
Томский политехнический университет, Томск*

E-mail: mitulinsky@tpu.ru

Алмаз, синтезированный методом химического осаждения из газовой фазы, является весьма востребованным материалом для множества промышленных применений, поскольку обладает рядом уникальных свойств. Эффективность многослойных пленок в сравнении с однослойными пленками микро- (МКА) и нанокристаллического алмаза (НКА) была неоднократно показана в литературе [1]. Тем не менее, многослойные алмазные покрытия уступают в износостойкости однослойным МКА покрытиям [2]. Поскольку физико-механические свойства МКА выше, в работе выдвинута гипотеза, что уменьшение толщины НКА слоев позволит повысить износостойкость пленки за счет увеличения доли МКА, при сохранении других преимуществ многослойной структуры. В данной работе представлены структурная характеристика и трибологический анализ многослойной пленки с периодической ренуклеацией (тонкие подслои НКА) (М1), а также сравнение с однослойной пленкой МКА (S1) и типичной многослойной пленкой с сопоставимым соотношением МКА и НКА (М2).

Алмазные пленки были синтезированы методом химического осаждения из газовой фазы, в качестве подложек использовались пластины монокристаллического кремния (100) и шарики карбида кремния. Параметры осаждения были следующими: температура подложки 850 ± 20 °C, давление в камере 20 ± 2 Торр, проток водорода 100 мл/мин, проток метана 6 и 20 мл/мин при синтезе МКА и НКА, соответственно. В работе применялись следующие методы исследования: СЭМ, АСМ, конфокальная микроскопия, Рамановская спектроскопия. Трибологические испытания проводились на машине трения по методу «шар-диск».

Структура синтезированных алмазных пленок показана на рис. 1, а, б, в. Общая толщина всех пленок ~ 9 мкм. Шероховатость поверхности равняется 867, 311 и 281 нм для образцов S1, M1 и M2, соответственно. Данные трибологического испытания показаны на рис. 1г, д. Также показано сравнение с шариком карбида кремния без покрытия. Образцы с многослойными покрытиями имеют вдвое меньшие значения коэффициента трения (0,07 и 0,08), чем однослойный образец S1 (0,15). Более того, многослойные образцы отличаются значительно меньшей дистанцией прира-

ботки (~ 35 м). Скорость износа контртел (дисков Al_2O_3) у образцов с многослойными пленками также в два раза ниже, чем у однослойного образца. Образец S1 имеет наименьшую скорость износа $4,57 \times 10^{-9} \text{ мм}^3 \text{Н}^{-1} \text{м}^{-1}$, тогда как образцы M1 и M2 имеют значения скорости износа $6,01 \times 10^{-9} \text{ мм}^3 \text{Н}^{-1} \text{м}^{-1}$ и $8,58 \times 10^{-9} \text{ мм}^3 \text{Н}^{-1} \text{м}^{-1}$ соответственно. То есть скорость износа образца M1 на 43 % ниже, чем у M2.

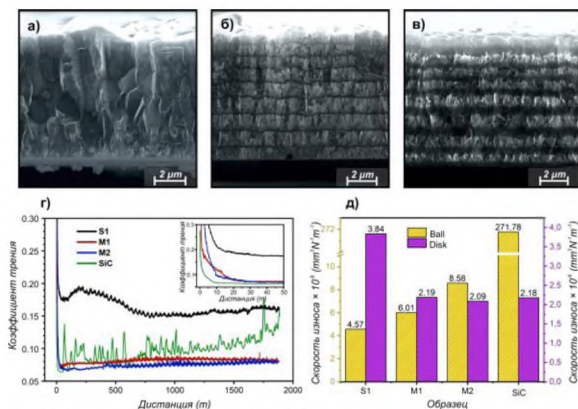


Рис. 1: а – СЭМ изображение S1; СЭМ изображение M1; СЭМ изображение M2; г – график коэффициента трения; д – график скорости износа

Полученные результаты подтверждают гипотезу о том, что доля микрорекристаллического алмаза в пленке напрямую коррелирует с ее износостойкостью. Также показано, что пленка M1 сохраняет свойства, присущие стандартным многослойным структурам алмаза.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ в рамках научного проекта № 21-79-10004. Исследования выполнены с использованием оборудования ЦКП «Нанотех» ИФПМ СО РАН.

Литература

1. Wu Y., Yang Y., Yan G., Cristea D. Wear behaviour of gradient-multilayer diamond coatings deposited on cemented-carbide substrates // Surface Engineering. – 2022. – Vol. 38, № 4. – P. 507–519.
2. Wang H., Song X., Wang X., Sun F. Fabrication, tribological properties and cutting performances of high-quality multilayer graded MCD/NCD/UNCD coated PCB end mills // Diamond & Related Materials. – 2021. – Vol. 118. – P. 108505.

ИССЛЕДОВАНИЕ ОБРАЗЦОВ ПРОКАТА С ДЕФЕКТОМ «ЦВЕТОВЫЕ ОТТЕНКИ (ЖЕЛТИЗНА)»

Д.Д. Мохоров

*Санкт-Петербургский Государственный
Политехнический Университет, Санкт-Петербург*

E-mail: dan.mokhorov@gmail.com

Проблема поверхностных дефектов холодного прокатного производства широко распространена по всему миру. В связи с большим разнообразием в морфологии встречающихся дефектов возникают трудности с идентификацией дефектов и разработкой методов борьбы с ними. Однако, кроме известных видов дефектов, периодически встречаются дефекты, которые имеют неизвестную природу возникновения. Данные виды дефектов не регламентируются нормативно-технической документацией, но не удовлетворяют требованиям заказчика по качеству поверхности холоднокатаного листа.

В практике металлургических заводов встречаются дефекты типа «цветовые оттенки (желтизна)» (далее по тексту – дефект типа «желтизна»), которые имеют периодический характер возникновения. Причины проявления данного дефекта не известны, а также не известны технологические методы борьбы с данным дефектом. Он имеет вид разводов и полос в один-два ручья (реже пятен) золотисто-коричневого цвета разной интенсивности (от золотистого до темно-коричневого), расположен хаотично по длине и ширине полосы (преимущественно по середине полосы) как с одной, так и с обеих сторон проката, ориентирован вдоль направления проката) (рис. 1).

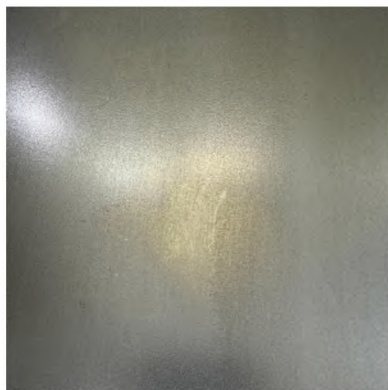


Рис. 1. Дефект типа «желтизна»

Технологический процесс производства холоднокатаного проката состоит из следующих операций:

- 1) поступление по подземным коммуникациям рулонов из цеха горячей прокатки на широкополосном стане;
- 2) охлаждение в рулонах (хранение на складе цеха);
- 3) снятие окалины – травление;
- 4) холодная прокатка;
- 5) рекристаллизационный отжиг;
- 6) дрессировка;
- 7) отделочные операции (обрезка кромок, правка и пр.)

Дефект типа «желтизна» проявляется в случае, когда рекристаллизационный отжиг проводится в колпаковых печах с азотно-водородной защитной атмосферой, однако, в случае продувки водородной атмосферой или отжига в проходных печах, дефект практически отсутствует. После процесса дрессировки дефект становится явно выраженным, он образуется на стадии отжига рулонов, однако, в процессе дрессировки, под действием щелочной среды дрессировочной жидкости, происходит «окрашивание» дефекта, что делает его «заметным».

Выдвинуто предположение, что дефект типа «желтизна», по описанию внешнего вида, похож на дефекты типа «Пятно загрязнений» в сочетании с «Пятнистым науглероживанием». При этом может возникать дефект типа «Цвета побежалости», вероятно, как сопутствующий дефект.

Путем реализации математического моделирования было выявлено, что эмульсол после прокатки не выдувается полностью в процессе холодной продувки защитным газом, оставаясь между витками рулона за счет разнотолщины полосы, что говорит о низкой эффективности холодной продувки защитным газом. В процессе отжига происходит возгонка эмульсола, а присадки начинают гореть и продукты горения осаживаются на поверхности полосы, и ввиду высокой адгезии металл-эмульсол, продукты горения имеют прочное сцепление с поверхностью. Для исключения данного дефекта была предложена новая схема продувки металла защитной атмосферой, что приведет к избавлению от остатков эмульсола между витками в рулонах, и как следствие от реакции его с металлом.

Литература

1. ГОСТ 21014-2022.Metalloпродукция из стали и сплавов. Дефекты поверхности. Термины и определения. Взамен ГОСТ 21014-88; введ. 2022-03-31. – М.: Российский институт стандартизации, 2022. – 102 с.

ВЛИЯНИЕ РЕЖИМА ИЗОТЕРМИЧЕСКОГО ОТЖИГА НА МИКРОСТРУКТУРУ И МИКРОТВЕРДОСТЬ СПЛАВА CoFeMnNi

А.С. Нифонтов^{1,2}

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Национальный исследовательский
Томский политехнический университет, Томск

E-mail: alexeyn@ispms.ru

Семейство сплавов на основе многокомпонентной системы CoCrFeMnNi (высокоэнтропийный сплав Кантора) на данный момент изучено наиболее полно [1]. На его основе разрабатывают среднеэнтропийные сплавы с улучшенными физико-механическими свойствами: четырех- и трехкомпонентные [1, 2]. Структурно-фазовое состояние таких сплавов описано в литературе достаточно подробно, однако, фазовый состав и стабильность сплава CoFeMnNi исследованы недостаточно [1–2]. Цель данной работы – выявить влияние изотермических отжигов на микроструктуру и фазовый состав четырёхкомпонентного сплава CoFeMnNi.

В качестве материала для исследования был выбран сплав CoFeMnNi с ГЦК кристаллической решёткой: 25,8 % Co, 24,4 % Fe, 24,1 % Mn, 25,7 %Ni (ат. %). Была проведена его термомеханическая обработка (ТМО): прокатка с обжатием до 80 % с последующим отжигом при $T = 1200^{\circ}\text{C}$ в течение 2 часов, в результате которой были получены однофазные образцы с разориентированной крупнокристаллической структурой. После ТМО были проведены изотермические отжиги при $T = 700, 800$ и 900°C . Поверхности исследуемых образцов изучали методом растворовой электронной микроскопии (РЭМ) с помощью микроскопа Thermo Fisher Scientific Apreo S LoVac с приставкой для микроанализа и дифракции обратно-рассеянных электронов (ДОЭ). Микротвердость измеряли методом Виккерса на микротвердомере AFFRI DM8 с нагрузкой 100 г.

Средний размер зерна в образцах после ТМО был рассчитан по данным ДОЭ-анализа, он составлял 180 ± 90 мкм. В процессе отжигов в образцах не происходит рекристаллизации, и размер зерна остается постоянным. Однако наблюдалась повышенная травимось образцов, особенно вблизи границ зерен. На этом основании предположили, что отжиги сопровождаются образованием частиц вторичных фаз, однако методами РЭМ и ДОЭ они не были выявлены. На основании полученных данных сделан промежуточный вывод о том, что изотермические отжиги могут приводить к образованию частиц ультрадисперсных фаз, но для их идентификации необходимы дальнейшие исследования.

На рис. 1 представлены зависимости микротвердости от продолжительности отжигов (t). На зависимости, полученной для температуры отжига 800°C (рис. 1а), выявлено несколько стадий, свидетельствующих о сложной кинетике дисперсного твердения и многостадийности этого процесса. Рост микротвердости при t от 0,5 до 3 ч характерен для выделения когерентных частиц, а при последующем увеличении t более 3 часов, их размер и доля возрастает, теряется когерентность между матрицей и частицами, и происходит «перестаривание» сплава. Второе повышение микротвердости связано с формированием другого типа частиц, для которых кинетика старения более быстрая. При этом изменение температуры отжига в диапазоне от 700 до 800°C не влияет на стадийность, но вызывает смещение стадий к меньшим значениям t , что указывает на увеличение скорости образования частиц при увеличении температуры отжига.

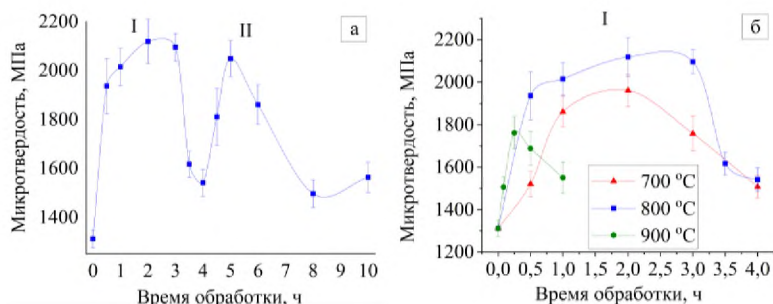


Рис. 1. Зависимость микротвердости образцов от продолжительности отжига: а – $T=800^{\circ}\text{C}$; б – $T=700^{\circ}\text{C}$, 800°C , 900°C , I стадия старения

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 20-19-00261, <https://rscf.ru/project/20-19-00261/>. Исследования проведены с использованием оборудования ЦКП «Нанотех» (ИФПМ СО РАН, Томск). Автор выражает благодарность научному руководителю Е.Г. Астафуровой за помощь в проведении исследования.

Литература

1. J. Brechtel P.K. Liaw (eds.) / High-Entropy Materials: Theory, Experiments, and Applications // Springer Nature Switzerland AG 2021 (eBook).
2. Fabio Da Costa Garcia Filho, Robert O. Ritchie, Marc Andre Meyers, Sergio Neves Monteiro / Cantor-derived medium-entropy alloys: bridging the gap between traditional metallic and high-entropy alloys // Journal of Materials Research and Technology. – 2022. – Vol. 17 (March–April). – P. 1868–1895.

ВЛИЯНИЕ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ С ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИЕЙ ПРИ 900°С НА ОСОБЕННОСТИ МИКРОСТРУКТУРЫ ФЕРРИТНО- МАРТЕНСИТНОЙ СТАЛИ ЭК-181

В.В. Осипова

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: lera.linnik.1999@mail.ru

Эффективность ядерной энергетики определяется рабочей температурой ядерного реактора и степенью выгорания ядерного топлива. Это предъявляет высокие требования по жаропрочности и радиационной стойкости конструкционных материалов, используемых в качестве оболочек тепловыделяющих элементов (ТВЭЛов). В настоящее время во всем мире приоритетными конструкционными материалами для ядерных и термоядерных энергетических реакторов нового поколения являются 9 и 12 %-ные хромистые ферритно-мартенситные стали благодаря комплексу их физико-механических свойств [1–3]. Эффективным способом модификации структурно-фазового состояния, а также повышения жаропрочности ферритно-мартенситных сталей являются термомеханические обработки. Одним из наиболее перспективных российских представителей реакторных сталей ферритно-мартенситного класса является 12%-ная хромистая дисперсно-упрочненная сталь ЭК-181 (Fe-12Cr-2W-V-Ta-B).

Традиционная термическая обработка (ТТО) такой стали заключается в нормализации при 1100 °С и высокотемпературном отпуске при 720 °С (3 ч.). Термомеханическая обработка (ТМО) заключалась в нагреве до 1100°С с выдержкой 1 ч., охлаждении до 1000°С (30 мин.), охлаждении до 900°С с выдержкой 30 мин и последующей пластической деформации на 50% на пласометрическом комплексе ОПТ (ИМАШ УрО РАН Екатеринбург). После ТМО проводился дополнительный отпуск при 720°С, 1 ч.

Исследование микроструктуры проводили с помощью просвечивающего электронного микроскопа (ПЭМ) JEOL JEM-2100 (ускоряющее напряжение 200 кВ). Микротвердость стали по Виккерсу измеряли с помощью микротвердомера AFFRI DM 8 с нагрузкой 200 г в течение 10 сек.

Исследование тонких фольг показало, что проведенная в данной работе термомеханическая обработка (включая отпуск) приводит к изменению микроструктуры. Средняя ширина мартенситных ламелей после ТМО в 3 раза меньше, чем после традиционной термообработки. В микроструктуре обнаружено множество грубодисперсных карбидов $M_{23}C_6$, а также мелко- и грубодисперсных карбонитридов типа MX. Размеры ча-

стиц M23C6 при этом уменьшаются в 2 раза, по сравнению с соответствующими размерами после ТТО. Кроме того, после ТМО наблюдается рост плотности дислокаций

Микротвердость стали ЭК-181 после традиционной термообработки составляет 2.8 ГПа. Значения микротвердости после проведенной ТМО с деформацией при 900°C однородны по образцу, без отпуска они составляют 5.8 ГПа, с отпуском – 2.8 ГПа.

Таким образом, термомеханическая обработка с пластической деформацией при 900°C обеспечивает заметное измельчение параметров микроструктуры (размеров мартенситных ламелей и дисперсных частиц M₂₃C₆), по сравнению с таковыми после ТТО. При этом значения микротвердости после ТМО и высокотемпературного отпуска сравнимы с соответствующими значениями после ТТО.

Автор выражает благодарность научному руководителю д. ф.-м. н., доцента Литовченко И.Ю. за организацию исследовательской работы и обсуждение полученных результатов. Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема № FWRW-2021-0008.

Литература

1. Yin S. et al. Effect of thermomechanical treatment on MX phase precipitation behavior in CLAM steel // Fusion Engineering and Design. – 2021. – Vol. 173. – P. 112785-1 – 112785-10.
2. Shruti P. et al. The Role of Thermomechanical Processing in Creep Deformation Behavior of Modified 9Cr-1Mo Steel // Metallurgical and Materials Transactions A. – 2019. – Vol. 50. – P. 13002-1 – 13002-12.
3. Samant S. S., Singh I. V., Singh R. N. Effect of thermo-mechanical treatment on high temperature tensile properties and ductile–brittle transition behavior of modified 9Cr-1Mo steel // Metallurgical and Materials Transactions A. – 2020. – Vol. 51. – P. 3869–3885.

ИЗМЕНЕНИЕ СТРУКТУРНО-ФАЗОВОГО СОСТОЯНИЯ И МИКРОТВЕРДОСТИ ПРЕКУРСОРОВ ПОРОШКОВОЙ СМЕСИ 3Ti-1.15Al В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ПРОДОЛЖИТЕЛЬНОСТИ МЕХАНИЧЕСКОЙ АКТИВАЦИИ

В. Д. Пасько

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: vladimirpasko84@mail.ru

Механическая активация (МА) является одним из эффективных способов получения прекурсоров из порошков металлов и их смесей, обеспечивающий диспергирование и перемешивание плохо взаимодействующих компонентов [1, 2]. Исследование особенностей формирования высокодефектных наноструктурных состояний в прекурсорах на стадии МА на сегодняшний день является актуальной задачей, необходимой для развития фундаментальных представлений и технологий получения объемных материалов. В данной работе проведено исследование влияния продолжительности МА на структурно-фазовое состояние и микротвердость прекурсоров из порошковой смеси 3Ti-1.15Al.

Исследование проводилось на смеси порошков 3 Ti (99.9 %, марки ПТОМ-2) – 1.15 Al (98 %, марки ПА-4), механически активируемой в планетарной шаровой мельнице АГО-2 с водяным контуром охлаждением при центробежном ускорении 400 м/с^2 (40 g). Для предотвращения окисления обработку и выгрузку образцов осуществляли в атмосфере аргона. Продолжительность МА составляла 1.5, 3.5, 5.5 и 7.5 мин. Морфология прекурсоров изучена с применением сканирующего электронного микроскопа Tescan Vega 3 SBH (30 кВ). Исследования методом рентгеноструктурного анализа выполнены на рентгеновском дифрактометре Shimadzu XRD 6000 с использованием излучения Cu K α . Микротвердость (H_v) определялась методом Виккерса на приборе «Neophot 21» при нагрузке 0.5 Н с выдержкой не менее 10 с.

Согласно данным электронной микроскопии, в прекурсор после 1.5 мин МА отсутствуют порошки исходной морфологии изначальных элементов. Наблюдается объединение частиц в крупные конгломераты, размеры которых не превышают 100 мкм. При МА продолжительностью 3.5 мин происходит образование крупных конгломератов (до 150 мкм) овализированной формы, и более мелких пластинчатой формы. После 5.5 мин МА наблюдается дробление крупных конгломератов, а размер частиц прекурсора варьируется от нескольких мкм до 70 мкм. Увеличение продолжительности МА до 7.5 мин сопровождается дальнейшим диспер-

гированием и овализацией конгломератов, размеры которых не превышают 50 мкм.

По данным рентгенофазового анализа в порошковой смеси 3Ti-1.15Al после МА продолжительностью 1.5 мин помимо фаз исходных компонентов (α -Ti, Al) были обнаружены следы оксидных фаз TiO₂ и Al₂O₃. При увеличении продолжительности МА до 3.5 мин наблюдается формирование интерметаллидной фазы Ti₃Al. По мере увеличения продолжительности МА до 5.5 и 7.5 мин, наблюдается увеличение объемной доли Ti₃Al, и появление, помимо указанных ранее фаз, β -Ti, интерметаллида TiAl и оксида TiO.

Как было показано выше, с увеличением продолжительности высокоэнергетической МА в порошковой смеси 3Ti-1.15Al формируются конгломераты из частиц титана и алюминия, а также происходит их частичная овализация, которая сопровождается резким увеличением протяженности границ сопряжения титана и алюминия, фрагментацией кристаллической решетки и образованием высокодефектного структурного состояния. Это, как известно [3], способствует синтезу интерметаллидных фаз (Ti₃Al, TiAl) при температурах существенно ниже температур, приведенных на фазовой диаграмме состояний. Указанные изменения структурно-фазового состояния обеспечивают поэтапное увеличение уровня микротвердости, максимальное значение которой достигает 4.66 ГПа после 7.5 мин МА.

Таким образом, продолжительность предварительной механической активации смеси порошков 3Ti-1.15Al оказывает определяющее влияние на структурно-фазовое состояние и значения микротвердости получаемых прекурсоров.

Автор выражает благодарность своему научному руководителю к. ф.-м. н. Осипову Д.А. за организацию исследовательской работы и обсуждение полученных результатов. Результаты получены с использованием оборудования ТМЦКП ТГУ.

Литература

1. Suryanarayana C. Mechanical alloying and milling // Prog. Mater Sci. – 2001. – № 46 – P. 1–184.
2. Rogachev A. S. et al. Experimental investigation of milling regimes in planetary ball mill and their influence on structure and reactivity of gasless powder exothermic mixtures // Powder Technol. – 2015. – № 274. – P. 44–52.
3. Ditenberg I. A. et al. Influence of ball milling duration on the morphology, features of the structural-phase state and microhardness of 3Ni-Al powder mixture // Adv. Powder Technol. – 2021. – Vol. 32, № 10. – P. 3447–3455.

ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ БИОСОВМЕСТИМОГО ПОРИСТОГО МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ НИКЕЛИДА ТИТАНА С ДОБАВКОЙ Ti И Ni

С.А. Пахолкина, Е.А. Большевич, В.Г. Рыжакова

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: pakholkina200362@gmail.com

Работа направлена на улучшение используемых в настоящее время эндопротезов ребер на основе сплавов TiNi. В результате диффузионного спекания порошковой системы TiNi и активации процессов диффузии, возможно создание особой шероховатой поверхности стенок пор в пористо-проницаемых материалах на основе никелида титана. Благодаря введению реакционной добавки в порошковую часть эндопротеза, сохраняются высокие характеристики монолитной части, а также повышается биосовместимость за счет более развитой поверхности. Поэтому целью данной работы является исследование влияния реакционной добавки Ti и Ni на структурные особенности пористого материала на основе TiNi.

Для создания экспериментальных образцов использовали порошок TiNi (ПВ–Н55Т45), полученный методом гидритно кальциевого восстановления, а также порошки Ti (ПТЭМ-1) и Ni (ПНК–ОТ4). Получено две смеси: А (TiNi-5Ti-0,5Ni) и Б (Ti-Ni), которые смешивали в различной пропорции ([1:1], [1:0,75], [1:0,5], [1:0,25]). Для спекания порошок засыпали в кварцевые капсулы, которые имели внутренний диаметр 13–14 мм и длину 65–80 мм. Однократное спекание выполняли в течение 15 минут в электровакуумной печи СНВЭ-1,31/16-И4.

Структуру металлической матрицы полученных образцов исследовали методами оптической и растровой электронной микроскопии (РЭМ) с использованием микроскопов Axiovert–40 MAT и Quanta 200 3D, соответственно. Концентрационный состав фаз определяли с помощью энергодисперсионного спектрометра EDAX ECON IV. Фазовый состав исследовали методом рентгеноструктурного анализа на дифрактометре Shimadzu XRD-6000 с Cu K α -излучением.

Пористость образцов измеряли по формуле:

$$\Pi = \left(1 - \frac{\rho_{\text{пор}}}{\rho_{\text{мон}}}\right) * 100\%$$

где $\rho_{\text{пор}}$ – плотность пористого образца; $\rho_{\text{мон}}$ – плотность монолитного образца.

Определена температура спекания для каждого соотношения, при котором получают пористые материалы с интервалом пористости 55–60 %. Для образца с наибольшей реакционной добавкой температура выдержки составила 1000°C, для образца с наименьшей 1100°C. Показано, что благодаря внесению экзотермических добавок порошков Ti и Ni в различной пропорции к гидридно-кальциевому порошку TiNi сохраняется развитая пористая структура, снижается значение температур спекания. Оценена теплота ΔQ , выделившаяся в ходе экзотермической реакции между Ti и Ni (таблица).

Результаты измерения ΔQ

Тип образца	1:1	1:0,75	1:0,5	1:0,25
m(Ti+Ni), г	52,39	39,89	27,39	14,89
ΔQ , кДж	32,45	24,71	16,96	9,22

Исследование микроструктуры полученных образцов методом растровой электронной микроскопии выявило более неоднородный фазово-химический состав, что является следствием введения экзотермических добавок Ti и Ni. Исследование химического состава методом энергодисперсионного микроанализа подтвердило вышеуказанные результаты. Состав соединения TiNi для полученных образцов составил 49,8–51 ат. % Ni.

Данные рентгенофазового анализа показывают, что в материале содержатся аустенитная фаза TiNi (B2, кубическая сингония, пространственная группа 221, $a = 3.015 \text{ \AA}$), мартенситная TiNi (B19', моноклинная сингония, пространственная группа 11, $a = 4.6500 \text{ \AA}$, $b = 4.1074 \text{ \AA}$, $c = 2.9084 \text{ \AA}$, $\beta = 97.8^\circ$), а также вторичные фазы Ti_2Ni (пространственная группа 227, $a = 11.3513 \text{ \AA}$), следы фазы $TiNi_3$ (пространственная группа 194, $a = 5.1751 \text{ \AA}$, $c = 8.3521 \text{ \AA}$). Как правило у фаз, содержащих титан, пики находятся рядом друг с другом. Подобное поведение наблюдается и в исследуемом материале для фаз Ti_2Ni и TiNi(B19'). Эталоны этих фаз одновременно имеют пики на $41,5^\circ$, что затрудняет правильную оценку качественного анализа содержания данных фаз. Предполагается снижение прочности материала из-за двух факторов: повышенного содержания мартенситной фазы (до 25–30%) и фазы Ti_2Ni (до 20–25%). Для образцов 1:0,75 содержание фазы $TiNi_3$ максимально (до 10%).

Полученные пористые материалы на основе сложной порошковой шихты удовлетворяют цели создания пористой части композиционных материалов на основе никелида титана.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ в рамках научного проекта № 19-79-10045.

ЗАКОНОМЕРНОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ Mo-Zr И W-Zr ПОВЕРХНОСТНЫХ СПЛАВОВ МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОННО- ПУЧКОВОГО СИНТЕЗА

Е.А. Пестерев^{1,2}

¹Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск

²Томский научный центр Сибирского отделения
Российской академии наук, Томск

E-mail: pesterev.e.a@mail.ru

Молибден (Mo) и вольфрам (W) являются одними из представителей тугоплавких металлов, которые на протяжении многих десятилетий используются в различных отраслях промышленности. Наряду с другими тугоплавкими металлами, Mo и W рассматриваются как кандидаты для использования в качестве термодиффузионного барьерного слоя, который способен предотвращать взаимную диффузию между материалами при высоких температурах [1]. Получение таких многослойных систем возможно различными методами, один из которых – магнетронное напыление. Однако, к недостаткам магнетронных покрытий, можно отнести низкую адгезию нанесенной пленки с поверхностью подложки. Одним из способов повышения комплекса свойств металлов является формирование поверхностных сплавов при помощи низкоэнергетического сильно-точного электронного пучка (НСЭП) [2]. Обработка НСЭП является привлекательной, поскольку даже облучение чистого материала приводит к улучшению физических свойств за счет гомогенизации поверхности и ее сглаживания. Поэтому целью представленной работы был синтез Mo-Zr и W-Zr поверхностных сплавов, а также выявление закономерностей их формирования в зависимости от плотности приложенной энергии.

Синтез поверхностных сплавов осуществлялся на электронно-пучковой машине «РИТМ-СП» [3]. Процесс проходил путем циклического осаждения пленки Mo/W на подложку Zr и последующей НСЭП обработкой сформированной системы пленка/подложка в едином вакуумном цикле. Толщина напыляемой пленки составляла ≈ 2.5 мкм (при толщине ≈ 0.5 мкм за цикл), НСЭП обработка осуществлялась при плотности энергии $\approx 3.5, 4.5$ и 5.5 Дж/см² (8 импульсов на каждом цикле).

В ходе работы получено, что увеличение плотности энергии НСЭП приводит к снижению содержания Mo на поверхности с 73 ± 9 до 38 ± 2 ат. %. В случае W-Zr сплава наблюдается снижение W с 53 ± 39 до 26 ± 2 ат. %. При этом происходит сглаживание поверхности. Также с увеличением плотности энергии наблюдается рост высокотемпературной фазы β -Zr, стабилизированной Mo/W с включениями вторых фаз в виде Mo/W и

Mo₂Zr/W₂Zr. В ходе электрохимических испытаний получено, что высокая плотность энергии увеличивает коррозионные свойства поверхности. А на примере системы Mo-Zr показан существенный рост нанотвердости с 4 до 12 ГПа на участках с высоким содержанием вторых фаз в виде твердого раствора Zr в Mo и Mo₂Zr.

На основании представленных результатов можно сделать выводы, что увеличение плотности энергии приводит к более равномерному распределению Mo/W в приповерхностном слое. Матрица поверхностных сплавов состоит из твердого раствора Mo/W в β -Zr с включениями вторых фаз. Совокупность данных факторов приводит к улучшению коррозионной стойкости и увеличению нанотвердости образцов после НСЭП обработки.

Литература

1. Isayev R. Interaction of a diffusion barrier from the refractory metals with a zirconium alloy and a chrome coating of an accident tolerant fuel // Nucl. Eng. Des. – 2022. – Vol. 407. – P. 112307.
2. Ahmad M. Characterization of electron beam modified surface of Zircaloy-4 // J. Alloy. Compd. – 2006. – Vol. 426, № 1–2. – P. 176–179.
3. Markov A.B. А ПИТМ-СП facility for the surface alloying // Instruments and Experimental Techniques. – 2011. – Vol. 54. – P. 862–866.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАЧАЛЬНЫХ СТАДИЙ РОСТА КАРБИДА КРЕМНИЯ НА КРЕМНИИ ИЗ МОНОМЕТИЛСИЛАНА

В.А. Петраков

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: petrakov-vladislav99@yandex.ru

Карбид кремния – перспективный материал, который находит свое применение во многих отраслях, таких как силовая электроника, ядерная энергетика, строительство [1]. Известно более двухсот политипов SiC. В частности, SiC может служить подложкой для эпитаксиального роста графена. Кубический 3C-SiC является единственным политипом, растущим на подложке из кремния, при этом ориентация 3C-SiC зависит от ориентации подложки Si. В свою очередь, ориентация 3C-SiC сильно влияет на свойства получаемого графена [2]. Поэтому выращивание 3C-SiC представляет собой перспективный способ получения эпитаксиального графена. Одним из методов получения тонких пленок карбида кремния является выращивание кристалла путем хемосорбции органических молекул, таких как монометилсилан или монометилхлорид, из газовой фазы на кремниевую подложку [3]. Ориентация Si выбирается исходя из требуемой ориентации поверхности 3C-SiC.

В случае выращивания карбида кремния из газовой фазы монометилсилана было показано, что температурная зависимость скорости роста поверхности 3C-SiC(100) на подложке Si(100) выглядит следующим образом (рис. 1):

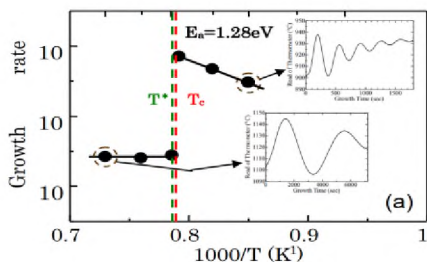


Рис. 1. Зависимость скорости роста SiC от температуры в аррениусовских координатах [2]

При температуре около $1000^\circ C$ наблюдается резкое изменение скорости роста, что является довольно необычным, поскольку обычно зависи-

мость скорости роста от температуры не претерпевает настолько резких разрывов. Поэтому представляет интерес выяснить механизм скачкообразного изменения скорости роста при формировании поверхности 3C-SiC.

Эта задача может быть решена с использованием компьютерного моделирования начальных стадий роста карбида кремния на поверхности кремния из газовой фазы монометилсилана. В настоящее время на языке программирования Python разработана программа, моделирующая рост кремния из SiH₄ при помощи кинетического метода Монте-Карло. В результате удалось получить зависимость скорости роста Si от температуры, которая качественно соответствует экспериментальным данным. После доработки программы для моделирования роста карбида кремния из монометилсилана мы ожидаем получить зависимость, также качественно соответствующую экспериментальным данным. Кроме того, на основе полученных в ходе моделирования данных мы сможем выявить механизм, обуславливающий резкое падение скорости роста.

Литература

1. Casady J., Johnson R. Status of Silicon Carbide (SiC) as a Wide-Bandgap Semiconductor for High-Temperature Applications: A Review // Solid-State Electronics. – 1996. – Vol. 39, № 11. – P. 1409–1422.
2. Suemitsu M. et al. High-rate rotated epitaxy of 3C-SiC(111) on Si(110) substrate for qualified epitaxial graphene on silicon // Materials Science Forum. – 2013. – Vol. 740–742. – P. 327–330
3. Silvestrelli P. L. Sbraccia C., Ancilotto F. Dissociative chemisorption of methylsilane on the Si(100) surface // J. Chem. Phys. – 2002. – Vol. 116, № 14. – P. 6291–6296.

ДИФРАКТОМЕТРИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ КЕРАМИКИ НА ОСНОВЕ ГИДРОКСИАПАТИА

М.В. Петрухин¹, Б.С. Кудряшов², А.Е. Резванова²

¹*Национальный исследовательский*

Томский политехнический университет, Томск

²*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

E-mail: gitarest.1234@gmail.com

Создание материалов для костных имплантатов является актуальным направлением развития науки материаловедения. Такие материалы должны обладать высокой биосовместимостью, биологической активностью, а также схожестью с механическими свойствами костных тканей человека [1]. Наиболее предпочтительным материалом с точки зрения биосовместимости является гидроксиапатит (ГА), относящийся к ортофосфатам кальция и являющийся природным аналогом костей и зубов. Недостатком ГА являются его низкие по сравнению с костными тканями механические свойства, такие как твердость, прочность, трещиностойкость [2]. Введение в керамическую матрицу ГА упрочняющих добавок многостенных углеродных нанотрубок (МУНТ), обладающих высокими прочностными характеристиками, позволяет повысить значения механических свойств керамики. Данные свойства взаимосвязаны с фазовым составом и дифрактометрическими параметрами тонкой кристаллической структуры керамического материала, такими как параметры кристаллической решетки (a/c), напряжения и деформации кристаллической решетки, а также область когерентного рассеяния (ОКР). В работе [3] показано существование корреляции среднего размера ОКР и микродеформации кристаллической решетки ГА со значениями модуля упругости, предела прочности, а также пластичностью материала. Таким образом, для установления взаимосвязи между дифрактометрическими параметрами и механическими свойствами необходимо оценить влияние добавок МУНТ на фазовый состав и значения параметров тонкой кристаллической структуры для установления дальнейшей взаимосвязи между данными параметрами и механическими свойствами.

Для выполнения поставленной задачи в работе использовался метод рентгеноструктурного анализа, основанный на физическом явлении рассеяния электромагнитного излучения в веществе. Были проведены исследования фазового состава и дифрактометрических параметров образцов керамики ГА без добавок, а также ГА с добавлением 0.5 масс. % МУНТ. Исследования выполнены на рентгеновском дифрактометре ДРОН-8Н (ИЦ Буревестник, Санкт-Петербург, Россия) в медном излучении с длиной волны $\lambda=1,5406 \text{ \AA}$ и шагом $0,05^\circ$. Фазовый состав и параметры кри-

сталлической решетки (a/c) определялись с использованием программного обеспечения “Match!”, дифрактометрические параметры рассчитывали с использованием программы “Rexp”.

Было установлено, что все образцы керамики содержат в себе фазы ГА с гексагональной кристаллической решеткой, а также фазы альфа- и бета-трикальцийфосфата с моноклинной и ромбоэдрической решетками, соответственно. Параметры кристаллической решетки фазы ГА отличаются незначительно, что позволяет сделать вывод о том, что введение добавок МУНТ не привело к качественному изменению фазового состава композитного материала ГА-МУНТ. Расчет параметров тонкой кристаллической структуры показал, что добавление 0.5 масс. % МУНТ привело к уменьшению среднего размера ОКР с 9.90 до 8.22 Å, в то время как средние величины напряжений и деформаций увеличиваются с 0.82 до 1.21 ГПа и с 0.0018 до 0.207, соответственно. Таким образом, из результатов исследования следует, что введение добавок МУНТ в матрицу керамики ГА позволяет изменять параметры тонкой кристаллической структуры ГА, что может в дальнейшем применяться для варьирования механических свойств исследуемой керамики.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема №FWRW-2022-0002. Исследования выполнены с использованием оборудования ЦКП «Нанотех» ИФПМ СО РАН». Авторы выражают благодарность научному руководителю д.ф.-м.н., заведующему ЛМИИФ ИФПМ СО РАН Пономареву А.Н. за организацию исследовательской работы и обсуждение полученных результатов, инженеру ЛМИИФ ИФПМ СО РАН, магистранту ТУСУР, Скоробогатову Д.Д. за участие в обсуждении и проверке работы.

Литература

1. Fiume E., Magnaterra G., Rahdar A., Verné E., Bairo F. Hydroxyapatite for biomedical applications: A short overview // *Ceramics*. – 2021. – Vol. 4, № 4. – P. 542–563.
2. Padovani G.C., Feitosa V.P., Sauro S., Tay F.R., Durán G., Paula A.J., Durán N. Advances in dental materials through nanotechnology: facts, perspectives and toxicological aspects // *Trends Biotechnol.* – 2015. – Vol. 33, № 11. – P. 621–636.
3. Кузнецов В.Н., Коршунов А.Б., Путляев В.И. и др. Модификация структуры и механических свойств биоцемента-гидроксиапатита ионизирующим излучением // *Физика и химия обработки материалов*. – 2010. – № 4. – С. 5–8.

AB initio РАСЧЕТЫ ЭНЕРГИЙ АДсорбции АТОМА КРЕМНИЯ НА КРАЕ И В ИЗЛОМАХ МОНОАТОМНОЙ СТУПЕНИ НА ПОВЕРХНОСТИ Si(100)

М.Б. Пидченко

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: michanpich@yandex.ru

Поверхность кремния Si(100) – базовая поверхность в микроэлектронике, используемая для формирования различных полупроводниковых структур. Элементарные процессы эпитаксиального роста кремния на данной поверхности широко исследовались различными методами, включая ab initio расчеты энергий адсорбции и миграции адатомов на террасах и на краях моноатомных SA и SB ступеней. Однако до сих пор отсутствуют надежные данные о энергиях адсорбции адатома в важном для описания кинетики эпитаксиального роста положении излома на ступени.

В данной работе расчет структурных и энергетических характеристик поверхности кремния проводился из первых принципов в рамках метода функционала электронной плотности. Для расчетов использовался пакет программ FHI-aims. Обменно-корреляционная энергия учитывалась в рамках приближения обобщенного градиента в параметризации Пердью–Бурке–Эрнцехофа [1]. Расчет дисперсионных взаимодействий проводился с использованием метода многоэлектронной дисперсии (MBD) [2].

Для моделирования излома использовалась ячейка, состоящая из двух слоев, зафиксированных в объемном положении, оборванные связи нижней поверхности ячейки насыщались атомами водорода. Положения атомов остальных слоев оптимизировались в ходе самосогласованного расчета. Излом конструировался путем изъятия четырех димеров из края SA ступени (рис. 1), в итоге образуются два излома, в которых присутствует участки краёв восстановленных (rebounded) и несвязанных (nonbonded) SB ступеней.

Результаты расчетов энергий адсорбции атома кремния в изломе относительно минимума потенциальной энергии адатома Si на террасе представлены в таблице в сопоставлении со значениями энергий адсорбции на крае SB ступени. В первой строке обозначены положения основных минимумов (в соответствии с номенклатурой работы [3]), во второй – энергии на крае SB ступени, в третьей - энергии в изломе.

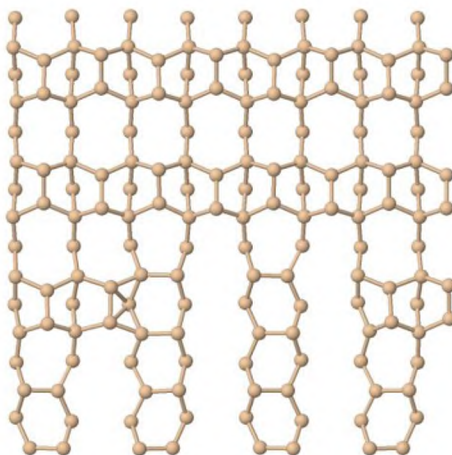


Рис. 1. Модель ячейки с изломом, вид сверху

Относительные энергии адсорбции, эВ

	M1	M2	M3	M4	M5	M6	M7	M8
E _{st}	0,000	0,073	0,646	0,393		0,468	0,883	1,079
E _k	- 0,163	0,224	0,795	0,406	0,443			

В соответствии с результатами, приведенными в работе [3], из полученных результатов следует, что положения с более низкой энергией находятся вблизи края rebounded ступени. Энергии атома в изломе отличаются от энергий на крае ступени, но при этом иерархия энергий в различных положениях не меняется.

Автор выражает благодарность С.Н. Филимонову и Ю.Ю. Эрвье за постановку задачи и обсуждение результатов.

Литература

1. Perdew P., Burke K., K. Ernzerhof // Phys. Rev. Lett. – 1996. – Vol. 77. – P. 3865–3868.
2. A. Tkatchenko et al. // Phys. Rev. Lett. – 2012. – Vol. 108. – P. 236402.
3. G. M. Dalpian, A. J. R. da Silva, A. Fazzio // Phys. Rev. B – 2004. – Vol. 70. – P. 193306.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ Fe^+ НА ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ ПЛЕНОК $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ И $\varepsilon\text{-Ga}_2\text{O}_3$ К H_2

Н.В. Плотников

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: nikita-plotnikov2020@mail.ru

Данная работа посвящена изучению газочувствительных свойств оксида галлия, а также рассмотрен метод ионной имплантации для улучшения этих характеристик. На данный момент существует только одна статья, затрагивающая эту тему [1].

Оксид галлия и его полиморфные модификации в настоящее время представляет особый интерес в связи с его уникальными свойствами.

Целью этой работы было изучение метастабильных фаз: $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ и $\varepsilon\text{-Ga}_2\text{O}_3$. Для экспериментов использовались образцы, содержащие следующие дозы железа: 0, 10^{13} , 10^{14} , 10^{15} см^{-2} . Исследования проводились при воздействии водорода. В работе были исследованы отклики, характеристики быстрого действия, концентрационные зависимости, а также электрические характеристики контрольных и облученных образцов.

В микрозондовой установке в атмосфере чистого воздуха были изучены электрические свойства. Получены ВАХ, при обработке которых можно было оценить влияние ионной имплантации. Концентрация доноров увеличивается по сравнению с чистыми пленками: $1.79 \cdot 10^{19}$, $1.72 \cdot 10^{19}$, $3.60 \cdot 10^{19}$, $3.07 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Здесь значения представлены в порядке увеличения дозы ионов железа, начиная с чистых образцов. Отметим, что при снятии ВАХ учитывалось, что образец можно рассматривать как структуру металл-полупроводник-металл. Тогда ВАХ можно представить на графике в координатах $\ln I$ от $U^{1/4}$. На основании полученных графиков, согласно работе [2], по наклону прямой можно найти концентрацию доноров.

При изучении газочувствительных характеристик использовалась следующая методика: благодаря попеременной подачи в микрозондовую установку чистого воздуха с расходом $1000 \text{ см}^3/\text{мин}$ и смеси водорода с воздухом с расходом водорода 1 % для температурных зависимостей, а также с расходами водорода 0.2–1 % для получения концентрационной зависимости. Были получены зависимости сопротивления от времени. На основании этих зависимостей были построены температурные зависимости отклика. Было обнаружено, что максимальный отклик двух полиморфных фаз Ga_2O_3 падает, причем наиболее сильно это происходит у $\varepsilon\text{-Ga}_2\text{O}_3$. Наблюдения показывают, что температура максимального отклика у $\varepsilon\text{-Ga}_2\text{O}_3$ в основном уменьшается по сравнению с контрольными образ-

цами: 600°C у контрольных образцов; 100°C, 150°C, 50°C у 10^{13} , 10^{14} , 10^{15} см⁻² соответственно, а у α -Ga₂O₃ эти температуры не изменились и равны 600°C. Параллельно с этим были найдены времена отклика и восстановления. Анализируя их, можно заключить, что время восстановления для пленок, облученных ионами железа дозой 10^{14} и 10^{15} см⁻² уменьшились. Времена отклика увеличились для всех образцов.

Далее, была получена зависимость отклика от концентрации H₂. Такая зависимость хорошо аппроксимируется степенной функцией. Учитывая предыдущие результаты, было принято решение исследовать концентрационную зависимость только для пленок ϵ -Ga₂O₃. Такое решение связано с тем, что изменения отклика для α -Ga₂O₃ очень слабые. Были получены следующие значения для показателя степени: 0.787; 0.280; 0.241; 0.260. Зная это, можно качественно и количественно оценить эволюцию поведения отклика для разных образцов данной полиморфной фазы.

Таким образом, ионная имплантация способна вносить изменения в электрические и газочувствительные характеристики данных образцов. Было обнаружено изменение электрических свойств. Показано, что влияние ионов железа на исследуемые пленки приводит к уменьшению отклика и изменению характеристик быстродействия. Температура максимального отклика для пленок ϵ -Ga₂O₃ при ионной имплантации уменьшилась по сравнению с контрольными образцами.

Автор выражает благодарность научному руководителю Алмаеву А.В. за организацию исследовательской работы и обсуждение полученных результатов.

Литература

1. Yakovlev N., Almaev A., Butenko P., Tetelbaum D., Mikhaylov A., Nikolskaya A., Pechnikov A., Stepanov S., Boiko M., Chikiryaka A., Nikolaev V. Effect of Si+ Ion Implantation in α -Ga₂O₃ Films on Their Gas Sensitivity // Materials physics and mechanics. – 2022. – Vol. 48, № 3. – P. 301–307.
2. H. Elhadidy, J. Sikula, J. Franc. Symmetrical current–voltage characteristic of a metal–semiconductor–metal structure of Schottky contacts and parameter retrieval of a CdTe structure // Semiconductor Science and Technology. – 2012. – Vol. 27, № 1. – P. 6.

СВОЙСТВА ФОТОДЕТЕКТОРОВ НА ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ $\text{Ga}_2\text{O}_3/\text{ZnGeP}_2$

С.Н. Подзывалов, Е.С. Слюнько, А.Б. Лысенко

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: cginen@yandex.ru

Бурное развитие нелинейной оптики привело к появлению целого ряда нелинейных кристаллов, используемых для целей удвоения частоты, параметрической генерации, генерации суммарных и разностных частот. Одним из таких нелинейных кристаллов является ZnGeP_2 , который в то же время является полупроводником. Для расширения возможностей использования данных кристаллов необходимо исследовать поведение в них примесей и дефектов. Впервые на базе материалов Ga_2O_3 и ZnGeP_2 были получены фотодетекторы, способные работать в фотовольтаическом режиме. Проведенные эксперименты со структурами $\text{Ga}_2\text{O}_3/\text{ZnGeP}_2$, показали их высокую чувствительность к ультрафиолетовому излучению.

Целью исследования стоит задача изучить влияние примеси на электрические и фотоэлектрические характеристики гетероструктур $\text{Ga}_2\text{O}_3/\text{ZnGeP}_2$.

Структуры $\text{Ga}_2\text{O}_3/\text{ZnGeP}_2$ обнаруживают чувствительность в дальнем УФ диапазоне и при воздействии длинноволнового излучения. Поэтому на их основе могут быть разработаны двуполостные детекторы. Гетероструктуры $\text{Ga}_2\text{O}_3/\text{ZnGeP}_2$ обладают фотовольтаическим эффектом, что позволяет использовать такие устройства для работы в автономном режиме. Свойства гетероструктур определяются характеристиками контактируемых материалов и гетерограницы.

ZnGeP_2 – это полупроводник p -типа проводимости с шириной запрещенной зоны $E_g \approx 2.0$ эВ при 300К. Для нелегированных кристаллов, полученных методом Бриджмена или горизонтально направленной кристаллизацией, концентрация дырок $p_0 = (1,5 - 2) \cdot 10^{11} \text{ см}^{-3}$, а подвижность носителей заряда $\mu_p = (92 - 230) \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ [1].

$\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ при комнатной температуре является изолятором, а при 500°C и выше обладает свойствами полупроводника, ширина запрещенной зоны которого лежит в интервале 4.23–5.24 эВ в зависимости от способа получения и последующих обработок. Термическая стабильность $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ позволяет использовать оксид галлия для разработки устройств, предназначенных для работы при повышенных температурах [2].

Образцы получали ВЧ-магнетронным напылением пленки оксида галлия на полированные пластины ZnGeP_2 , нелегированные и легированные Sn, Se, Pb либо Zn. Показано, что введение олова и селена приводит к

снижению темновых токов образцов по сравнению со структурами на нелегированных кристаллах ZGP (рис. 1).

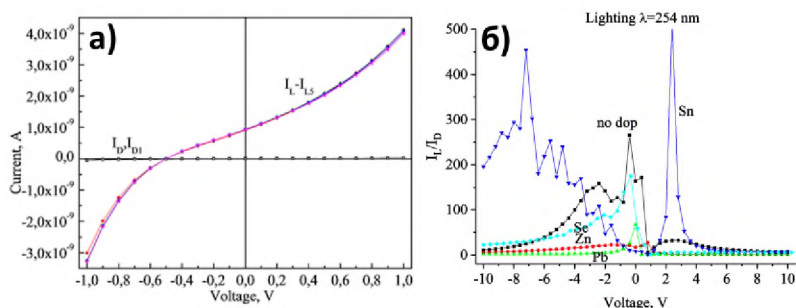


Рис. 1: а – Темновые ВАХ (ID, ID1) и при излучении с $\lambda = 254$ nm (IL), измеренные при непрерывном действии UV; б – Зависимость отношения I_L/I_D от напряжения на структуре при воздействии УФ излучения с оптической мощностью $P = 3 \cdot 10^{-3}$ W

Структуры обнаруживают фотовольтаический эффект под влиянием излучения как в UV диапазоне (254 nm), так и в длинноволновом при действии света с $\lambda = 445, 808$ и 1064 nm. Для получения солнечно слепых структур необходимо использовать кристаллы ZGP:Sn. Наибольший эффект снижения чувствительности к UV получен для образцов $\text{Ga}_2\text{O}_3/\text{ZnGeP}_2:\text{Pb}$.

Чтобы повысить чувствительность образцов к длинноволновому излучению пластины ZnGeP_2 целесообразно легировать Pb либо Zn. Поведение электрических и фотоэлектрических характеристик исследованных образцов при введении разных примесей не связано с параметрами ZGP, а, скорее всего, определяется изменением свойств гетерограницы $\text{Ga}_2\text{O}_3/\text{ZnGeP}_2$ в результате легирования.

Литература

1. Bulgakova V., Ushakov A., Chizhov P., Yudin N., Zinovev M., Podzyvalov S., Dolmatov T., Bukin V., Garnov S. Terahertz generation by means of ZnGeP_2 large aperture photoconductive antenna // Optical Engineering. – 2021. – Vol. 60, № 8. – P. 082015-1 – 082015-6.
2. Stepanov S.I., Nikolaev V.I. Gallium oxide: properties and applications - a review // Rev. Adv. Mater. 2016. – Vol. 44. – P. 63–68.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ СТРУКТУРНОЙ ДЕФОРМАЦИИ РЕЛЬСЫ ОТ РАЗЛИЧНЫХ УСЛОВИЙ

С.В. Поляков

*Санкт-Петербургский Государственный
Политехнический Университет, Санкт-Петербург*

E-mail: saveliy-polyakov@mail.ru

Проблема реализации производства рельсов актуальна в России: протяженность дорог, разные климатические условия, большие грузопотоки. Изготовление рельсов представляет собой достаточно сложный и дорогостоящий процесс, поэтому, для его реализации, целесообразно применить математическое моделирование производства (проката). Моделирование проводится с целью определения изменения структуры и свойств в процессе производства и снижения нагрузки на производственное оборудование.

При разработке и использовании математических моделей, прогнозирующих структуру и свойства, возникает необходимость в верификации конечного продукта путем сравнения его с экспериментальными данными. Для создания математической модели необходимы знания об изменениях температуры, степени и скорости деформации в каждый момент времени, т.к. от этого будут зависеть процессы, протекающие в структуре (рекристаллизация). В связи с тем, что определить необходимые параметры в процессе горячей прокатки невозможно, оптимальным инструментом является метод конечно-элементного моделирования (КЭМ).

Цель работы состоит в создании цифрового двойника рельсы и сравнении её характеристик с существующей для дальнейшей реализации этого метода в подобных проектах. Задача состоит в необходимости смоделировать три варианта проката (по каждому сечению). Для решения задачи применяется пакет программ конечно-элементного моделирования DEFORM 3D. Ввиду того, что результатом проката является рельса длиной порядка 110 м, процесс моделирования ограничивается вычислительными мощностями. Для оптимизации процесса моделирования, весь прокат делился на участки: А – область начала прокатки; Б – область середины прокатки; В – область окончания прокатки. При этом исходные размеры бруса составляли $365 \times 300 \times 500$ мм. Таким образом, количество элементов в модели уменьшается в 220 раз, что ускоряет расчёт. Разработка математической модели, и КЭМ, как ее составляющей, позволяет получить представление о зависимости пластического течения от изменения температуры моделируемого образца. Однако при КЭМ необходимо точно определить сечение проката. Это связано с различием тем-

ператур по сечениям в определенный момент времени, так как течение и рекристаллизация металла зависят от температуры.

Разность температур в начале и в конце проката сечений участков А и Б представлены на рис. 1.

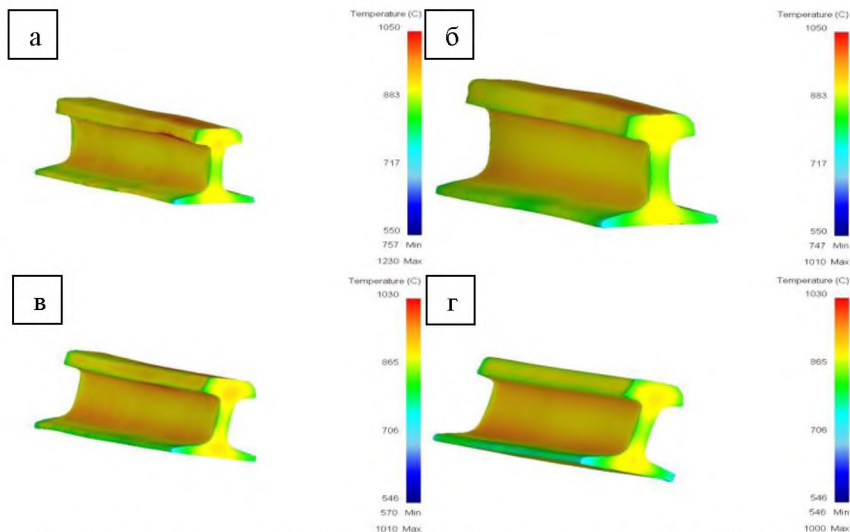


Рис. 1. Модельное представление изменения температуры после деформации прокаткой на участках А (а, б) и Б (в, г): а, в – сечение до проката; б, г – сечение после проката

В процессе реализации математической модели, была выявлена разница температур до и после проката и поэтапная деформация.

Представленный метод позволяет проводить анализ в виртуальной среде, что позволяет выявлять потенциальные проблемы и оптимизировать расчёт модели до начала физической реализации. Также это поможет снизить риски и избежать дорогостоящих ошибок.

ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД С ТЕМПЕРАТУРНЫМ ГИСТЕРЕЗИСОМ В ПЛЕНКАХ $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{Si}(111)$

С.А. Пономарев^{1,2}

¹Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск

²Новосибирский государственный университет, Новосибирск

E-mail: ponomarev@isp.nsc.ru

С начала XXI века слоистые двумерные (2D) материалы являются перспективными материалами для микроэлектроники, фотоники и фотовольтаики. В частности, слоистый In_2Se_3 представляет интерес для создания солнечных фотоэлементов, фотоприемников, работающих в диапазоне от УФ до ИК, и устройств памяти [1]. Однако, рост пленок In_2Se_3 сопровождается образованием различных дефектов, напрямую влияющих на их электронные и оптические свойства. Таким образом, исследование управляемого ван-дер-ваальсового роста пленок In_2Se_3 в совокупности с контролем фазы и изучение электронных свойств является актуальной темой для применения данного материала в приложениях современной электроники.

Ранее в работе [2] при измерении температурной зависимости электрического сопротивления пленки In_2Se_3 толщиной 8 нм было обнаружено два гистерезиса в области 20–40 К и 140–180 К. В диапазоне 140–180 К при охлаждении образца от комнатной температуры сначала наблюдалось резкое уменьшение сопротивления в $\sim 10^4$ раз в районе 140 К. Обратный переход происходил при повышении температуры выше 180 К. При этом, недавно методом сканирующей туннельной микроскопии в этом же диапазоне температур обнаружен фазовый переход $\beta \Leftrightarrow \beta'$ - In_2Se_3 [3], а на основе расчетов из первых принципов предсказывалось, что β' - In_2Se_3 имеет запрещенную зону на 0,45 эВ шире, чем β - In_2Se_3 .

В данной работе методом *in situ* отражательной электронной микроскопии на поверхности $\text{Si}(111)$ получена пленка β - In_2Se_3 толщиной около 70 нм для последующих измерений спектров комбинационного рассеяния света (КРС). Спектры КРС измерялись при охлаждении от комнатной температуры до 77 К и последующем обратном нагреве до комнатной температуры с шагом 10 К. При охлаждении до температур около 140 К наблюдалось исчезновение пика при 175 см^{-1} и последующее появление трех пиков при 155, 170 и 188 см^{-1} , соответствующих β' - In_2Se_3 . Более того, при нагреве пленки до температуры около 180 К наблюдалось повторное появление пика при 175 см^{-1} , соответствующего β - In_2Se_3 .

По данным ФЭСУР (рис. 1) при переходе β' - $\text{In}_2\text{Se}_3 \Rightarrow \beta$ - In_2Se_3 положение потолка состояний валентной зоны смещается с 0,9 эВ в направле-

нии больших энергий связи и находится на $\sim 1,5$ эВ ниже уровня Ферми, что соответствует ширине запрещенной зоны β - In_2Se_3 . При этом

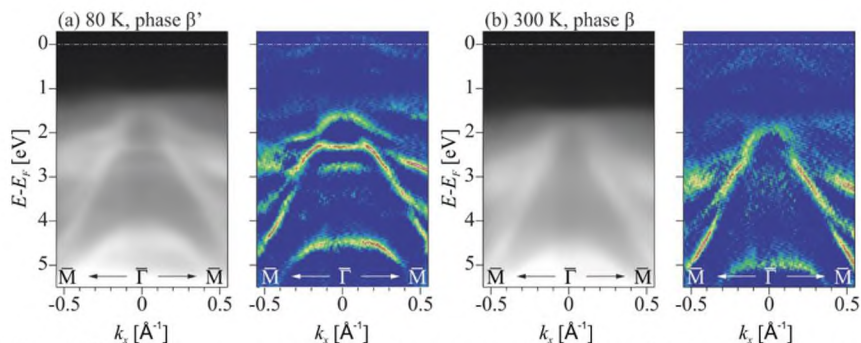


Рис. 1. Картины дисперсии состояний на поверхности пленки In_2Se_3 , полученные методом ФЭСУР в сечении М–Γ–М при температуре образца: а – 80 К и б – 300 К. Слева – фотоэмиссионные спектры, справа – соответствующие картины «кривизны» спектров

фаза β' обладает проводимостью n-типа, что может объяснять резкое уменьшение сопротивления пленки при переходе $\beta \Rightarrow \beta'$. Данный процесс согласуется с полученными ранее данными об изменении электрического сопротивления пленки In_2Se_3 в $\sim 10^4$ раз и атомной структуры поверхности In_2Se_3 .

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 22-72-10124) с использованием оборудования ЦКП «Наноструктуры».

Литература

1. Vishwanath S. Challenges and Opportunities in Molecular Beam Epitaxy Growth of 2D Crystals // Mol. Beam Ep. – Elsevier Inc. – 2018. – P. 443–485.
2. Ponomarev S.A. Thermal Hysteresis in the Resistance of In_2Se_3 Film on Si(111) Surface // 2021 IEEE 22nd International Conference of Young Professionals in Electron Devices and Materials (EDM), IEEE. – 2021. – Vol. 2021, № 18. – P. 50–53.
3. Zhang F. Atomic-Scale Observation of Reversible Thermally Driven Phase Transformation in 2D In_2Se_3 // ACS Nano. – 2019. – Vol. 13, № 7. – P. 8004–8011.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ КОРРОЗИОННОЙ СТОЙКОСТИ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ НИКЕЛИДА ТИТАНА

В.Г. Рыжакова, Е.А. Большевич, С.А. Пахолкина

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: ryzhakova.v@yandex.ru

Сплавы на основе никелида титана (TiNi) находят широкое применение в изготовлении имплантационных конструкций и медицинского инструментария благодаря уникальному сочетанию свойств, включающих сверхэластичность и эффект памяти формы. В перспективе использования сплавов TiNi в имплантологии важно знать их параметры коррозионной стойкости. Исходя из этого цель работы состоит в изучении коррозионной стойкости сплавов с различным состоянием поверхности материала.

В работе исследовали три типа образцов: TiNi-исх – исходная пластина TiNi в шлифованном и неотожжённом состоянии с минимальным оксидным слоем 3–5 мкм и дефектами от шлифовки; TiNi-исх/т – исходная пластина TiNi, отожжённая при температуре 900°C с оксидным слоем около 20 мкм; Ti-пл – пластина из титана марки ВТ-1, которая использовалась в качестве образца сравнения.

Для оценки коррозионных характеристик использовали метод вольт-амперометрии с линейной разверткой потенциала, при его изменении от –1 до +1 В со скоростью изменения развертки 3 мВ/с. Данный метод заключается в экстраполяции линейных участков анодной и катодной кривых, отвечающих уравнению Тафеля, к потенциалу коррозии. Экстраполяция линейных участков дает значения тока коррозии (I_{corr}), потенциала коррозии (E_{corr}). Шероховатость определяли методом оптической профилометрии с помощью прибора МНП-1. Скорость коррозии материала рассчитывали с использованием значений плотности тока коррозии по формуле (ASTM G102):

$$C_{\text{corr}}^* = 3,27 \times 10^{-3} I_{\text{corr}} EW / \rho,$$

где EW – эквивалентный вес материала; ρ – плотность материала; I_{corr} – полный анодный ток, мкА.

Исследование структурных особенностей экспериментальных образцов проводили методом растровой электронной микроскопии с помощью микроскопа QUANTA 200 3D. Исследование фазового состава выполнено с помощью рентгеноструктурного микроанализа на дифрактометре Shimadzu XRD 6000.

Показано, что структурно-фазовый состав поверхности образца TiNi-исх/т, представлен совокупностью фаз TiNi, TiO₂, Ti₂O₃, Ti₂Ni. В процессе прокатки и последующего отжига при температуре 900°C на поверхности образца формируется оксидный слой, основными компонентами которого выступают фазы TiO₂ и Ti₂O₃ (рис. 1).

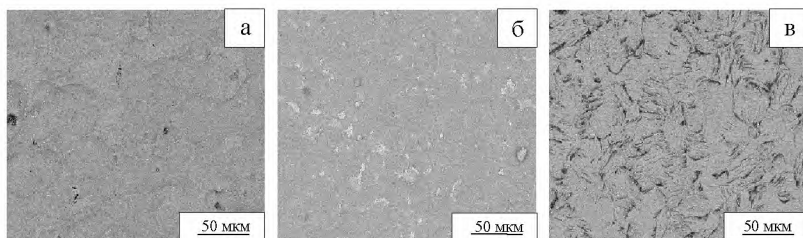


Рис. 1. Макроструктура сплавов никелида титана: а – TiNi-исх; б – TiNi-исх/т; в – Ti-пл

В таблице представлены параметры коррозионной стойкости экспериментальных образцов. Что касается тока коррозии $I_{\text{сог}}$ для образца TiNi-исх, его значение превосходит таковое для образца сравнения. Термообработка снижает величину $I_{\text{сог}}$ до 0,036 мкА. Термообработка в случае данного образца повышает величину потенциала коррозии.

Величины тока коррозии, потенциала коррозии, шероховатость и скорость коррозии исследуемых образцов

Образец	$I_{\text{сог}}$, мкА	$E_{\text{сог}}$, мВ	R_a , мкм	$C^*_{\text{сог}}$, мм/год
Ti-пл	0,058	-194,9	0,48	$7,6 \cdot 10^{-4}$
TiNi-исх	0,742	-358,5	1,41	$3,3 \cdot 10^{-3}$
TiNi-исх/т	0,036	-313,6	0,55	$4,3 \cdot 10^{-4}$

Наиболее устойчивым к коррозии является материал, для которого наблюдаются высокие значения потенциала коррозии и низкие значения величин тока. Однако, еще одной важной величиной, определяющей коррозионную стойкость материала, является скорость коррозии. Образец TiNi-исх/т имеет наименьшее значение $C^*_{\text{сог}}$ равное $4,3 \cdot 10^{-4}$ мм/год.

Исходя из совместного анализа параметров коррозии, установлено, что образец TiNi-исх./т наиболее устойчив к коррозии. Это связано с наличием оксидного слоя после термической обработки при 900°C.

Исследование выполнено за счет гранта РФФИ № 24-29-00735

ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСЕЙ И СТРУКТУРНЫХ ДЕФЕКТОВ НА КВАНТОВУЮ ЕМКОСТЬ И ТЕРМОЭДС ОДНОСЛОЙНОГО ГРАФЕНА

Т.А. Сапежинская^{1,2}

¹Национальный исследовательский

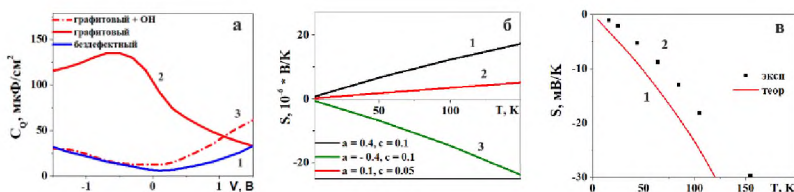
Томский Государственный Университет, Томск

²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

E-mail: litanyaalex@gmail.com

Физико-химические свойства графена чувствительны к изменению его кристаллической структуры, в частности, к допированию и легированию различными примесями, формированию структурного ближнего порядка в процессе роста и постобработки. Например, квантовая емкость графена с примесями существенно увеличивается по сравнению с чистым [1], а термоЭДС может быть как положительной, так и отрицательной в зависимости от типа беспорядка в материале [2]. В настоящей работе проведено исследование влияния примесей и ближнего порядка на изменение квантовой емкости и термоЭДС графена с использованием методов функционала электронной плотности, реализованного в открытом ПО Quantum Espresso, и температурных функций Грина в приближении времени релаксации.

В результате проведения исследования получен ряд оригинальных результатов (рис. 1).



а) кривая 1 – идеальный графен, кривая 2 – графен с азотом замещения, кривая 3 – графен с азотом замещения и ОН-группой; б) кривая 1 – концентрация 10% ($c=0.1$) во 2 координационной сфере (КС), кривая 2 – $c=0.1$ в 1 КС, кривая 3 – $c=0.05$ во 2 КС; в) кривая 1 – теоретические данные, кривая 2 – экспериментальные данные [2].

Рис. 1: а – квантовая емкость графена с различной структурой; б – $S(T)$ графена с различным расположением чужеродных атомов, формирующих структурный беспорядок; в – сравнение теоретической и экспериментальной зависимостей $S(T)$

Показано, что квантовая емкость графена с азотом в различных конфигурациях (замещения, пиридиновой и пиррольной) при концентрациях 2 и 4 %, а также при присоединении ОН-группы вблизи атома азота замещения повышается относительно бездефектного (рис. 1а). Последний тип дефектов будет вносить наиболее существенный вклад в полную емкость графена. Получено аналитическое выражение температурной зависимости термоЭДС $S(T)$ однослойного графена, включающее зависимость в явном виде от концентрации, параметра ближнего порядка (качественная и количественная характеристика ближнего порядка в материале), температуры, плотности электронных состояний вблизи уровня Ферми. Обнаружено, что примесной вклад в $S(T)$ линейно меняется с температурой и увеличивается с ростом концентрации примеси (рис. 1б). Тип беспорядка в структуре определяет отклонение $S(T)$ от линейной зависимости и ее знак: при расположении чужеродных атомов в 1 координационной сфере $S(T) < 0$, а во 2 координационной сфере $S(T) > 0$ (рис. 1б). Теоретически рассчитанная $S(T)$ качественно и количественно согласуется с экспериментально измеренной термоЭДС графена на подложке SiO_2 (рис. 1в) [2]. Полученные в настоящем исследовании результаты показывают важность учета примесей и структурного ближнего порядка в формировании особенностей изменения квантовой емкости и термоЭДС графена и могут быть использованы для создания материалов с необходимыми для практического применения физическими свойствами.

Выражаю благодарность научному руководителю Бобенко Н.Г. за организацию исследовательской работы и обсуждение полученных результатов. Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема номер FWRW-2022–0002.

Литература

1. Xu Q., Yang G., Fan X., Zheng W. Improving the Quantum Capacitance of Graphene-Based Supercapacitors by the Doping and Co-Doping: First-Principles Calculations // ACS Omega. – 2019. – Vol. 4, № 8. – P. 13209–13217.
2. Seo J.H., Jo I., Moore A.L. et. al. Two-dimensional phonon transport in supported graphene // Science. – 2010. – Vol. 328. – P. 213–216.

ОБРАТИМОЕ ГЦК-ГПУ МАРТЕНСИТНОЕ ПРЕВРАЩЕНИЕ И ЭФФЕКТ ПАМЯТИ ФОРМЫ В МОНОКРИСТАЛЛАХ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНОГО СПЛАВА $\text{Cr}_{20}\text{Mn}_{20}\text{Fe}_{20}\text{Co}_{37}\text{Ni}_3$

А.А. Сараева

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: Anastasia16-05@yandex.ru

Изменение концентраций Co в пределах от 30 до 40 ат. % и Ni в пределах от 10 до 0 ат. % при сохранении постоянной концентрации 20 ат. % остальных элементов в эквиажном высокоэнтропийном сплаве (ВЭС) Кантора CrMnFeCoNi приводит: к увеличению температуры равновесия ГЦК- и ГПУ-фаз от 195 до 410 К [1]; к уменьшению энергии дефекта упаковки (ЭДУ) [2] до $\gamma_0 = 0.014$ Дж/м²; к увеличению предела текучести исходной ГЦК-фазы и развитию обратимого ГЦК-ГПУ мартенситного превращения (МП) с эффектом памяти формы (ЭПФ) [1]. На поликристаллах $\text{Cr}_{20}\text{Mn}_{20}\text{Fe}_{20}\text{Co}_{35}\text{Ni}_5$ (ат. %) ВЭС был обнаружен ЭПФ 1.91 % при деформации на изгиб, а на монокристаллах этого сплава ЭПФ при растяжении составил 12.6, 6.8 и 3.6 % в $[\bar{1}44]$, $[\bar{1}11]$ и $[001]$ кристаллах, соответственно. Новые ВЭС с ГЦК-ГПУ МП имеют большой потенциал для практического применения, поскольку ВЭС характеризуются высокой пластичностью и низкой стоимостью компонентов, по сравнению со сплавами TiNi.

В данной работе впервые представлены исследования температурной зависимости предела текучести $\sigma_{0.1}(T)$ и ЭПФ при постоянной внешней нагрузке $\sigma_{\text{внеш}}$ (изобарический) и при постоянной температуре (изотермический) при деформации растяжением на монокристаллах ВЭС $\text{Cr}_{20}\text{Mn}_{20}\text{Fe}_{20}\text{Co}_{37}\text{Ni}_3$ (ат. %), ориентированных вдоль трех направлений $[001]$, $[\bar{1}11]$ и $[\bar{1}44]$. При концентрации Ni 3 ат. % температура начала прямого МП при охлаждении M_s сдвигается в сторону высоких температур, по сравнению с концентрацией Ni 5 ат. %, и в результате можно ожидать реализации высокотемпературного ЭПФ.

Монокристаллы $\text{Cr}_{20}\text{Mn}_{20}\text{Fe}_{20}\text{Co}_{37}\text{Ni}_3$ (ат. %) ВЭС были выращены методом Бриджмена в атмосфере инертного газа гелия. Показано, что обратимое МП характеризуется температурой $M_s = 295$ К и температурой конца обратного МП при нагреве $A_f = 484$ К и широким термическим гистерезисом $\Delta T_h = A_f - M_s = 189$ К.

Температурная зависимость критических напряжений $\sigma_{0.1}(T)$ в температурном интервале от 77 до 573 К имеет характерный вид для сплавов, испытывающих МП под нагрузкой. Минимальные напряжения $\sigma_{0.1}$ наблюдаются при температуре M_s , а максимальные напряжения $\sigma_{0.1}$

наблюдаются при температуре M_d , при которой напряжения в исходной высокотемпературной фазе равны напряжениям образования мартенсита под нагрузкой. При $T < M_s$ имеет место низкотемпературная стадия, связанная с термически-активируемым движением двойниковых и межфазных границ. В интервале $M_s < T < M_d$ наблюдается линейный рост напряжений $\sigma_{0.1}$ с увеличением температуры, что связано с развитием МП под нагрузкой и описывается соотношением Клапейрона-Клаузиуса

$$\frac{d\sigma_{0.1}}{dT} = -\frac{\Delta S}{\varepsilon_0} = -\frac{\Delta H}{T_0 \varepsilon_0}.$$

Здесь ε_0 – деформация превращения, ΔS , ΔH – соответственно, энтропия и энтальпия на единицу объема для ГЦК-ГПУ МП, T_0 – температура равновесия фаз. Третья стадия при $T > M_d$ связана с деформацией исходной ГЦК-фазы.

Показано, что ЭПФ зависит от ориентации и условий исследования: изобарической и изотермической деформации растяжением. Максимальный ЭПФ 12 ± 0.2 и 14 ± 0.2 % получен в ориентации $[\bar{1}44]$ при изобарической при $\sigma_{\text{внеш}} = 160$ МПа и изотермической деформации при 77 К, соответственно. В $[001]$ - и $[\bar{1}11]$ -монокристаллах при изобарической деформации при близких $\sigma_{\text{внеш}} = 160 - 170$ МПа ЭПФ был равен 1.3 и 2.9 %, соответственно, а при изотермической деформации при 77 К ЭПФ стал равным 2.5 и 5.8 %, соответственно.

Определены основные условия реализации максимального ЭПФ: развитие ГЦК-ГПУ МП в одной системе, отсутствие взаимодействия вариантов ГПУ-мартенсита и наличие ближнего порядка, который усиливает локализацию деформации в одной системе и затрудняет активацию вторичных систем.

Автор выражает благодарность д. ф.-м. н. Киреевой И.В. и д. ф.-м. н. Чумлякову Ю.И. за организацию исследовательской работы и обсуждение полученных результатов. Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 22-19-00016.

Литература

1. Lee J.I., Tsuchiya K., Tasaki W., Oh H.S., Sawaguchi T., Murakami H., Hiroto T., Matsushita Y., Park E.S. A strategy of designing high entropy alloys with high temperature shape memory effect // Scientific Reports. – 2019. – Vol. 9, № 13140. – P. 1–10.
2. Liu S.F., Wu Y., Wang H.T., He J.Y., Liu J.B., Chen C.X., Liu X.J., Wang H., Lu Z.P. Stacking fault energy of face-centered-cubic high entropy alloys // Intermetallics. – 2018. – Vol. 93. – P. 269–273.

УЧЁТ МЕХАНИЗМА ЗАРОЖДЕНИЯ МЕЖЗЕРЕННЫХ ТРЕЩИН В МНОГОУРОВНЕВОЙ МОДЕЛИ НЕУПРУГОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ АЛЮМИНИЯ

Г.Д. Селиванов

*Пермский национальный исследовательский
политехнический университет, Пермь*

E-mail: selivanovgd@gmail.com

В настоящее время остается важным вопрос об увеличении прочности и долговечности изделий из металлов, что достигается путем обработки материалов. Однако в процессе закалки, формовки и т.д. происходит накопление дефектов в их микроструктуре, а следом растет концентрация напряжений в различных областях металла. Такая локализация напряжений может привести к образованию трещин. Целью данной работы является определение условий, при которых происходит возникновение межзеренных трещин.

В исследовании предлагается построение многоуровневой математической модели для анализа и получения необходимых данных при нагружении алюминиевого образца. В модели выделяется макро- (представительный объём поликристалла) и мезоуровень (зерно). Применение многоуровневого подхода позволяет учесть эволюцию дефектной структуры материала на нескольких масштабных уровнях [2]. Например, оценить как границы зерен поликристалла способствуют концентрации напряжений и, следовательно, зарождению межзеренных трещин, а также при какой разориентации зерен это может произойти.

В модели применяется статистический подход, который основывается на рассмотрении элементов мезоуровня независимо друг от друга [2]. Так как исследование нацелено на изучение возникновения межзеренных трещин, возникает необходимость модификации статистического подхода при помощи явного учёта соседства зерен.

В качестве механизма-инициатора локализации напряжений было выбрано скопление дислокаций у границы зерна. Была реализована базовая модель для описания неупругого деформирования поликристалла алюминия, в качестве метода нагружения использовался простой сдвиг. Математическая постановка [1] модели была дополнена соотношением (1) [3], определяющим критическое напряжение сдвига для возникновения трещины τ_{ci} , с целью отслеживания момента зарождения несплошности в границе зерен:

$$\tau_{ci}^{(i,j)} = \tau_0 + \left[\frac{2\mu\pi\gamma_{eff}^{(i,j)}}{(1-\nu)d} \right]^{1/2} F(\chi, \chi_1), \quad (1)$$

где τ_0 – предельное напряжение, необходимое для начала пластической деформации, μ – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона, d – размер зерна, $F(\chi, \chi_1)$ – некоторый геометрический коэффициент зарождения трещины на границе зерна и $\gamma_{eff}^{(i,j)}$ – работа декогезии границы между парой зерен ($i, j = \overline{1, n}$ – порядковые номера зерен, n – количество зерен). Для удобства можно представить работу декогезии всех зерен представительного макрообъема в виде матрицы смежности, компоненты которой представляют собой величину параметра для смежных зерен, имеющих общую границу (2). Компоненты матрицы гамма учитывают соседство зерен в поликристалле и соответствуют каждой фасетке (межзеренной границе).

$$\gamma_{eff}^{(i,j)} \sim \begin{bmatrix} - & \gamma_{eff}^{(2,1)} & \dots & \gamma_{eff}^{(n,1)} \\ \gamma_{eff}^{(1,2)} & - & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & - & \gamma_{eff}^{(n,n-1)} \\ \gamma_{eff}^{(1,n)} & \dots & \gamma_{eff}^{(n-1,n)} & - \end{bmatrix}. \quad (2)$$

Таким образом, в работе была предложена модификация статистического подхода, реализована базовая двухуровневая модель для описания неупругого деформирования поликристалла алюминия, а также дополнена математическая постановка с учетом возникновения межзеренной трещины, что в дальнейшем позволит определить условия ее возникновения (допустимые нагрузки, углы разориентации зерен и др.).

Литература

1. Селиванов Г.Д. Построение математической модели для анализа деформирования и межзеренного разрушения поликристаллов // Математическое моделирование в естественных науках. – 2023. – Т. 1. – С. 292–294. – EDN GHHCJW.
2. Трусов П. В. Классические и многоуровневые конститутивные модели для описания поведения металлов и сплавов: проблемы и перспективы // Известия российской академии наук. Механика твердого тела. – 2021. – № 1. – С. 69–82.
3. Wenbin Liu, Yangyang Cheng, Haonan Sui, Jiaqi Fu, Huiling Duan. Microstructure-based intergranular fatigue crack nucleation model: Dislocation transmission versus grain boundary cracking // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. – 2023. – № 173.

ВСТРЕЧНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СВЕТОВЫХ ВОЛН В КРИСТАЛЕ СИЛИКАТА ВИСМУТА СРЕЗА (111)

Р.А. Симонян, П.В. Мостепан, В.В. Мурашкин

*Томский государственный университет
систем управления и радиоэлектроники, Томск*

E-mail: razmik.a.simonian@tusur.ru

Лазерные голографические интерферометры могут быть использованы для измерения сверхмалых амплитуд механических колебаний зеркально или диффузно отражающих поверхностей [1]. Такие интерферометры основаны на эффекте демодуляции фазы сигнального пучка в модуляцию его интенсивности [2] при попутном или встречном взаимодействии со стационарным опорным пучком на фоторефрактивной голограмме в кристаллах класса силленитов, к которым относится силикат висмута ($\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$). За счет величины и высокой скорости фоторефрактивного отклика, а также возможности изготовления кристаллов с различными ориентациями голографические интерферометры, построенные на кристаллах силленитов, адаптивны к медленным изменениям окружающей среды [1, 2].

Таким образом, исследование физических свойств фоторефрактивных кристаллов класса силленитов, применяемых при разработке подобных голографических систем, является актуальной задачей.

Вследствие поглощения и оптической активности силленитов наибольшую эффективность взаимодействия на отражательных голограммах, сформированных сигнальной и опорной световыми волнами, имеющими линейные поляризации, достигают подбором толщины кристалла, так как коэффициенты связи взаимодействующих на голограмме волн в данном случае зависят от координат. В случае же встречного взаимодействия световых волн с круговыми поляризациями коэффициенты двухпучковой связи не изменяются при прохождении световых волн через кристалл, то есть являются уже не зависящими от координат [3].

В настоящем сообщении приводятся результаты экспериментального исследования встречного взаимодействия световых волн, имеющих циркулярные поляризации разных знаков вращения, для ориентаций волновых векторов взаимодействующих волн и отражательной голограммы, вдоль кристаллографических направлений $[111]$ и $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ в гиротропном кристалле $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$.

Исследования встречного взаимодействия фазомодулированной сигнальной волны, имеющей правую (левую) круговую поляризацию, со стационарной опорной волной, имеющей левую (правую) круговую поляризацию, на отражательной голограмме в кристалле $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ среза

(111) проводилось на лабораторной установке адаптивного голографического интерферометра [1].

При обработке полученных экспериментальных данных использовались коэффициенты связи Γ_a и Γ_E , характеризующие вклады в фоторефрактивный отклик абсорбционной составляющей голограммы и электрооптического эффекта соответственно, а также Γ_f , характеризующий вклады фотоупругости и обратного флексоэлектрического эффекта [3].

Коэффициент $\Gamma_a = 0,236 \text{ м}^{-1}$ получен при исследовании поглощения кристалла $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ на длине волны $\lambda = 633 \text{ нм}$. Коэффициенты $\Gamma_f = 3,6 \text{ м}^{-1}$ и $\Gamma_f = -3,6 \text{ м}^{-1}$, а также $\Gamma_E = 2,5 \text{ м}^{-1}$ и $\Gamma_E = -19 \text{ м}^{-1}$ получены при аппроксимации экспериментальных данных теоретическими зависимостями по методу наименьших квадратов при распространении опорной волны вдоль оси $[111]$ и $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ соответственно.

Получено, что коэффициент Γ_f для различных направлений ориентаций векторов решетки и световых волн вдоль направлений $[111]$ и $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ равны по модулю, но противоположны по знаку, а коэффициенты Γ_E также отличаются по модулю в 7,5 раз для всех проведенных экспериментов.

Авторы выражают благодарность научному руководителю Шмакову С.С., а также Шандарову С.М. и Буримову Н.И. за организацию исследовательской работы и обсуждение полученных результатов. Работа выполнена в рамках Госзадания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации на 2023–2025 годы (задание FEWM-2023-0012/3).

Литература

1. Исследование амплитудных характеристик голографического интерферометра / С.С. Шмаков, А.С. Котин, С.М. Шандаров, Н.И. Буримов // Южно-сибирский научный вестник. – 2012. – № 1. – С. 198–200.
2. Two-wave mixing on reflection dynamic gratings in sillenite crystals under phase modulation of signal beam / S.M. Shandarov, A.A. Kolegov, N.I. Burimov et al. // Physics of Wave Phenomena. – 2009. – Vol. 17, № 1. – P. 39–44.
3. Взаимодействие и дифракция световых волн с циркулярной поляризацией на динамических голограммах в кубических гиротропных кристаллах / С.М. Шандаров, Н.И. Буримов, А.О. Злобин и др. // Невская фотоника-2023. Всероссийская научная конференция с международным участием сборник научных трудов. – СПб., 2023. – С. 64.

ЗАВИСИМОСТЬ ЛУЧЕВОЙ ПРОЧНОСТИ ДИФОСФИДА ЦИНКА-ГЕРМАНИЯ ОТ ПОСТРОСТОВЫХ ОБРАБОТОК

Е.С. Слюнько, С.Н. Подзывалов, А.Ш. Габдрахманов

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: elenohka266@mail.ru

Нелинейные преобразователи частоты, работающие в диапазоне длин волн 3,5–5 мкм и в области 8 мкм, перспективны для организации оптической связи в атмосфере в рамках глобальных систем передачи информации поколения 6G [1]. Также источники когерентного излучения среднего ИК излучения применяются для обработки материалов методом скрайбирования и термораскола в медицине.

Исследования, представленные в данной публикации, являются логическим продолжением результатов, полученных в [2], и посвящены экспериментальной оценке влияния глубинного съема (до 150 мкм) с поверхности монокристалла ZnGeP_2 (ZGP) методом магнитореологического полирования (МРО) на параметры оптического пробоя (LIDT).

Для проведения исследований были изготовлены 4 образца монокристалла ZGP с размерами $6,1 \times 6,1 \times 20$ мм³. Исследуемые образцы были вырезаны из одной и той же монокристаллической булы ZGP под углами $\theta = 54,50$ и $\varphi = 0,0$ относительно оптической оси. Монокристаллическая буля ZnGeP_2 была выращена методом Бриджмена в вертикальном направлении на ориентированной затравке. Рост производился из расплавленного поликристаллического соединения, предварительно синтезированного двух температурным методом [3].

Для определения порога оптического пробоя образцов использовалась методика «R-on-1». Суть этой методики заключается в том, что каждая отдельная область кристалла облучается лазерным излучением при последовательном повышении интенсивности лазерного излучения до тех пор, пока не произойдет оптический пробой или не будет достигнуто заранее заданное значение плотности энергии. В нашей работе исследование проводилось с длительностью экспозиции $t_{\text{ex}} = 5$ с. Исследуемый образец подвергался воздействию пакетов лазерных импульсов с фиксированным уровнем плотности энергии, не вызывающим повреждения поверхности кристаллов. Далее уровень плотности энергии увеличивался с шагом $\sim 0,1$ Дж/см².

Проведены экспериментальные исследования влияния параметров МРО полировки на LIDT кристаллов ZGP. Показано, что глубина МРО полировки значительно влияет на LIDT кристалла ZGP. При МРО съеме

материала с поверхности кристалла более 30 мкм наблюдается значительное уменьшение LIDT поверхности ZGP, а для глубины МРО полировки 17,8 мкм, наоборот, наблюдается увеличение LIDT по сравнению с кристаллом ZGP со стандартной полировкой. При глубине съема материала 17,8 мкм параметры LIDT увеличиваются в 1,18 раза.

Показано, что зависимость порога оптического пробоя ZGP от глубины МРО полировки представляет собой гладкую монотонно убывающую логарифмическую функцию. Выдвинуто предположение, что полученная логарифмическая зависимость указывает на тепловую природу оптического пробоя и зависимость LIDT ZGP от концентрации поверхностных поглощающих дефектов. Полученные зависимости прогнозируют, что уменьшение глубины МРО полировки до значений в несколько микрометров приведет к дальнейшему увеличению LIDT. Однако данные теоретические предположения требуют экспериментального подтверждения. Рекомендовано на практике МРО обработку кристаллов ZGP проводить со съемом материала с поверхности не более 20 мкм.

Авторы выражают благодарность кандидату физ-мат. наук Юдину Н.Н. за помощь в подготовке и проведении исследования.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-10193, <https://rscf.ru/project/23-79-10193.%22>

Литература

1. Yulong Su, Jiacheng Meng, Tingting Wei, Zhuang Xie, Shuaiwei Jia, Wenlong Tian, Jiangfeng Zhu, Wei Wang. 150 Gbps multi-wavelength FSO transmission with 25-GHz ITU-T grid in the mid-infrared region // *Optics Express*. – Vol. 31, № 9. – P. 15156.
2. Yudin N., Khudoley A., Zinoviev M. Podzvalov S., Slyunko E., Zhuravleva E., Kulesh M., Gorodkin G., Kumeysheva P., Antipov O. The Influence of Angstrom-Scale Roughness on the Laser-Induced Damage Threshold of Single-Crystal ZnGeP₂ // *Crystals*. – 2022. – Vol. 12. – P. 83.
3. Verozubova G.A., Gribenyukov A.I., Mironov Yu.P. Two-temperature synthesis of ZnGeP₂ // *Inorganic Materials*. – 2007. – Vol. 43. – P. 1040–1045.

МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ БИМОРФА НА ОСНОВЕ ВИДОМЕННОГО МОНОКРИСТАЛЛА НИОБАТА ЛИТИЯ

И.С. Сырых

Университет науки и технологий МИСИС, Москва

E-mail: m1803494@edu.misis.ru

Биморфные пьезоэлектрические преобразователи широко применяются в устройствах точной механики и сенсорики. Наиболее распространенными являются биморфы, в которых пластинки цирконата-титаната свинца (ЦТС) соединены эластичным промежуточным слоем. Узкий диапазон рабочих температур ЦТС и клеевых слоев ухудшает свойства устройств и делают невозможным их применение при высоких температурах. Для приложений, требующих сочетания высокой точности одновременно с высокой термостабильностью и способностью работать в широком диапазоне температур, были предложены биморфы на основе бидоменных кристаллов ниобата лития (LiNbO_3 , LN). Такие кристаллы содержат два макроскопических домена со встречно направленными векторами спонтанной поляризации. Приложение электрического поля к бидоменному кристаллу приводит к удлинению одного из доменов и укорачиванию другого за счет действия обратного пьезоэффекта, что приводит к изгибу кристалла в целом. При этом отсутствие в бидоменных монокристаллах межзеренных и клеевых границ позволяет описывать свойства биморфа на его основе простыми аналитическими моделями, полученным в работе [1].

Решая обратную задачу для результатов измерения амплитуды отклонения свободного конца консольно закрепленного бидоменного кристалла при приложении к нему переменного электрического поля, можно с высокой точностью определить значения модуля Юнга и поперечного пьезоэлектрического коэффициента материала. Повторив такое исследование для набора бидоменных кристаллов LN различных кристаллографических срезов, можно получить значения матрицы пьезомодулей для стандартной установки кристалла. При этом способность бидоменных кристаллов деформироваться по биморфной схеме вплоть до точки Кюри позволяет изучать свойства LN в широком диапазоне температур, недоступном для других методов.

Распространенные сейчас методы измерения пьезоэлектрических коэффициентов, либо требуют подготовки набора образцов определенной геометрии, либо позволяют исследовать только некоторые из пьезоэлектрических модулей. Более того, измерение толщинных высокочастотных резонансов затруднительно при высоких температурах из-за зашумленности сигнала и падения добротности из-за роста проводимости материала. Поэтому использование бидоменных кристаллов может стать удобной

альтернативой для изучения пьезоэлектрических свойств LN при температурах вблизи точки Кюри.

В данной работе возможность определения поперечного пьезоэлектрического коэффициента и модуля Юнга была проверена на бидоменных кристаллах LN у+128°-среза прямоугольной формы с размерами $L \times w \times t = 51 \times 5 \times 0,5 \text{ мм}^3$, направление ширины биморфа совпадало с кристаллофизической осью x . Переменный электрический сигнал подавали на электроды с помощью синхронного детектора MFLI. Перемещения свободного конца биморфа измеряли с помощью лазерного интерферометра SP 5000 NG, аналоговый сигнал с которого передавали на вход синхронного детектора. Таким образом была получена зависимость амплитуды колебаний кристалла от частоты переменного сигнала, подаваемого на него. Полученная АЧХ с помощью метода наименьших квадратов была аппроксимирована аналитической функцией для решения обратной задачи по нахождению значений d'_{23} и E'_{33} по методу имитации отжига. Основная идея этого вероятностного метода решения задачи оптимизации состоит в поиске глобального минимума целевой функции аналогично тому, как минимизируется термодинамическая энергия при длительной термообработке вещества.

В результате обработки экспериментальных точек, получены значения $d'_{23} = 24,6 \text{ пм/В}$, $E'_{33} = 134 \text{ ГПа}$ для кристалла LN Y+128°-среза, что хорошо согласуется с литературными данными [2]. Таким образом, в работе показано, что отсутствие в бидоменных монокристаллах LN межзеренных и клеевых границ позволяет с высокой точностью предсказывать свойства биморфных актюаторов на основе таких кристаллов и моделировать перемещения в широком диапазоне частот при помощи аналитических моделей. Кроме того, важным следствием такого близкого к «идеальному» поведения биморфов является возможность применять их в качестве модельных образцов для измерения эффективных значений поперечного пьезоэлектрического коэффициента и модуля Юнга.

Литература

1. Smits J.G., Ballato A. Dynamic admittance matrix of piezoelectric cantilever bismorphs // Journal of Microelectromechanical Systems. – 1994. – № 3 (3). С. 105–112.
2. Chen F. [и др.]. The electromechanical features of LiNbO3 crystal for potential high temperature piezoelectric applications // Journal of Materiomics. – 2019. – № 1 (5). – С. 73–80.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАЧАЛЬНОЙ СТАДИИ ФОРМИРОВАНИЯ НИТЕВИДНЫХ НАНОКРИСТАЛЛОВ МЕТОДОМ СЕЛЕКТИВНОЙ ЭПИТАКСИИ

М.А. Тамошкин

Национальный исследовательский
Томский политехнический университет, Томск
E-mail: mat48@tpu.ru

Процесс образования и развития ансамблей ННК (нитевидных нанокристаллов [1]) условно возможно разделить на три этапа: зарождение ННК, формирование ансамбля ННК, а также непосредственно рост кристаллов в ансамбле. В настоящее время существует большое количество разнообразных моделей, описывающих физические процессы во время указанных выше этапов [2].

Целью данной работы является исследование возможности применения классического клеточного автомата фон Неймана [3] для описания процесса диффузии атомов по поверхности подложки на начальной стадии зарождения ансамбля ННК методом селективной эпитаксии из газовой фазы. Использование теории клеточных автоматов обладает значительными преимуществами как с точки зрения простоты программной реализации, так и с точки зрения объема требуемых вычислительных ресурсов. Поэтому развитие данного метода моделирования для детального описания начального этапа зарождения ансамбля ННК представляет несомненный интерес.

Схематическое изображение зарождения ННК при осаждении из газовой фазы в условиях роста внутри областей, образованных с помощью технологии селективного травления, представлено на рис. 1. Рост кристаллов происходит за счет накопления осаждаемого материала под каплей катализатора Au в результате двух существенно различающихся процессов. Первый из них (процесс *I* на рис. 1) представляет собой диффузию атомов осаждаемого вещества по поверхности подложки в область под каплей катализатора. Второй (процесс *II*) заключается в попадании атомов потока осаждаемого вещества непосредственно на поверхность капли катализатора. Область полупроводниковой подложки Si, образованная селективным травлением представляет собой участок, ограниченный барьером из слоя диэлектрика (например, SiO₂).

Вклад второго процесса пропорционален геометрической вероятности попадания атомов в области, ограниченные каплями катализатора. Величина вклада первого процесса, помимо геометрической вероятности, также зависит и от коэффициента диффузии атомов по поверхности подложки. В данном случае перемещение атома за один шаг алгоритма рав-

новероятно между 5-ю ближайшими узлами кристаллической решетки полупроводниковой подложки, включая исходную. В данной работе не учитывается взаимодействие между диффундирующими атомами. Предполагается, что за счет большой разности химических потенциалов атомов, находящихся внутри и ввне капли катализатора, вероятность образования островков паразитного роста внутри рассматриваемой области мала.

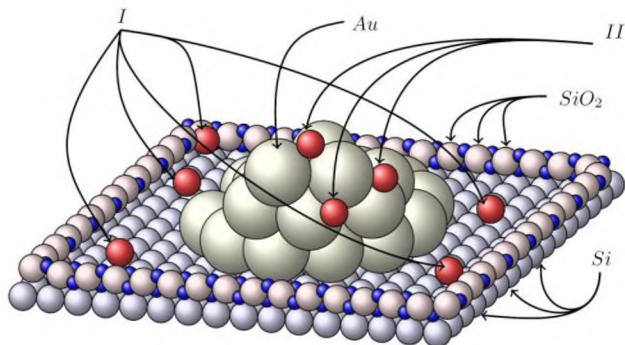


Рис. 1. Процессы образования ННК на начальной стадии роста

Следует отметить, что указанные механизмы вносят вклад в рост и на последующих этапах, когда осаждаемый материал вследствие диффузии по боковой поверхности отдельно стоящих ННК достигает их вершин и тем самым увеличивает среднюю высоту ансамбля ННК [2].

Автор выражает искреннюю признательность научному руководителю Шипуле М.А. и научному консультанту Эрвье Ю.Ю. за организацию исследовательской работы и плодотворное обсуждение полученных результатов.

Литература

1. Wagner, R. S. Vapor-liquid-solid mechanism of single crystal growth // Applied Physics Letters. – 1964. – № 4. – С. 89.
2. Dubrovskii V.G. Nucleation theory and growth of nanostructures. – Springer, Heidelberg – New York – Dordrecht – London, 2014.
3. Toffoli T. Cellular Automata Machines: A New Environment for Modeling. – MIT Press, 1987. – 262 с.

МИКРОСТРУКТУРА И МИКРОТВЕРДОСТЬ СПЛАВА V–W–Cr–Zr В ЗАВИСИМОСТИ ОТ СТЕПЕНИ ДЕФОРМАЦИИ ПРИ КРУЧЕНИИ НА НАКОВАЛЬНЯХ БРИДЖМЕНА

В.И. Толстихин

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: tolstikhin.off@mail.ru

Проведено изучение особенностей трансформации микроструктуры и изменения микротвердости сплава V–W–Cr–Zr в условиях деформации кручением на наковальнях Бриджмена. Деформацию образцов-дисков толщиной ≈ 0.2 мм (после деформации ≈ 0.15 мм) и диаметром (R) 8 мм производили кручением под высоким давлением (7 ГПа) при комнатной температуре и числе оборотов наковален (N) равном 0.1, 1 и 5. Величина истинной логарифмической деформации изучаемых образцов изменяется от $e \approx 1.1$ (при R = 0.5 мм, N = 0.1) до $e \approx 6.9$ (при R = 3.5 мм, N = 5).

Выявлено три основных этапа реализации механизмов пластической деформации и изменения микроструктуры в результате их выполнения.

На первом этапе ($e < 3$) фрагментация микроструктуры происходит путем реализации не только дислокационных механизмов, что приводят к появлению полос скольжения и сброса, активизации поворота крупных зерен в соответствии с законом Шмида, согласно которому зерна стремятся повернуться и вытянуться вдоль максимальных сдвиговых напряжений (направления в плоскости наковален). Но и в локальных областях образца реализуется дислокационно-дисклинационный механизм, приводящий к формированию границ с переменным вектором разориентации в результате коллективных перестроек сильновзаимодействующих хаотически распределенных дислокаций. В результате при $e \approx 1.1$ исходные равноосные зерна размерами 10–60 мкм трансформируются в крупные вытянутые в направлении под углом 20–45° относительно направления параллельного плоскости наковален зерна шириной 10–40 мкм и длиной от 40 до нескольких сотен мкм. При этом часть зерен (5 об. %) фрагментируются в мелкие зерна, ширина и длина которых составляет 0.5–5 мкм и 5–20 мкм, соответственно. Они встречаются как внутри крупных зерен, так и вблизи их приграничных областей. В крупных и мелких зернах наблюдаются субзерна шириной 0.15–0.5 мкм и длиной от 0.2 мкм до несколько мкм отдельные границы, которых обладают переменным вектором разориентации. В результате при $e \approx 1.1$ значения микротвердости повышаются в 1.8 раза (с 1.6 до 2.9 ГПа) по сравнению со значениями до деформации.

Второй этап (при $e \approx 3\text{--}5.3$) характеризуется достижением высокопрочного состояния, в котором дислокационные моды подавлены, и пластическая деформация осуществляется механизмами отличными от дислокационных – активизируются дисклинационные и квазивязкие моды пластической деформации. Таким образом, при $e \approx 3$ весь объем материала характеризуется анизотропным субмикроструктурным состоянием, которое представлено вытянутыми в направлении параллельном плоскости наковален зернами шириной 0.05–0.3 мкм, длиной 0.1–1.5 мкм, разделёнными малоугловыми границами на субзерна шириной 0.05–0.3 мкм, длиной 0.1–0.5 мкм. Такая анизотропия микроструктуры является следствием анизотропии полей смещений и поворотов, характерных для данного метода интенсивного деформационного воздействия [1]. При этом в отдельных субзернах и зернах формируются наноструктурные двухуровневые состояния, представленные фрагментами размерами 3–20 нм, в которых значения кривизны кристаллической решетки могут составлять 50 град/мкм. При достижении $e \approx 5.3$ происходит как измельчение субмикроструктурной структуры (ширина и длина зерен составляет 0.05–0.15 мкм и 0.05–0.8 мкм, а ширина и длина субзерен – 0.05–0.15 мкм и 0.05–0.2 мкм, соответственно), так и создание почти в каждом из них наноструктурных двухуровневых состояний. Установлено, что значения микротвердости при $e \approx 3$ увеличиваются до 4.1 ГПа, а при $e \approx 3.3$ – до 4.4 ГПа и достигают при этом насыщения и вплоть до $e \approx 6.9$ не изменяются.

Третий этап (при $e \approx 5.3\text{--}6.9$) заключается в реализации в основном только квазивязких механизмов, при которых совершаются повороты одних фрагментов двухуровневой структуры относительно других. При этом размеры зерен и субзерен, значения микротвердости (4.4 ГПа) не меняются.

Автор выражает благодарность: д.ф.-м.н., профессору Чернову В.М. и Потапенко М.М. (ОАО «ВНИИНМ им. Бочвара», Москва) за предоставленный сплав, научному руководителю к.т.н., Смирнову И.В. за организацию исследовательской работы и обсуждение полученных результатов. Исследование проведено с использованием оборудования ЦКП ИФПМ СО РАН «НАНОТЕХ» и ТМЦКП ТГУ. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-01096, <https://rscf.ru/project/23-79-01096/>

Литература

1. Ditenberg I.A., Tyumentsev A.N., Grinyaev K.V. et al. Evolution of the defect substructure in V-4Ti-4Cr alloy under severe plastic deformation // Tech. Phys. – 2011. – Vol. 56, № 6. – P. 815–820.

ИССЛЕДОВАНИЕ МАРТЕНСИТНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ ПОД НАГРУЗКОЙ В СПЛАВАХ С ПАМЯТЬЮ ФОРМЫ НА ОСНОВЕ NiFeGa(B)

А.Б. Тохметова, И.Д. Курлевская

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: aida-tx@mail.ru

Сплавы с памятью формы на основе NiFeGa, испытывающие термоупругие мартенситные превращения (МП), являются перспективными материалами для использования их в качестве замены парокompрессионного охлаждения на альтернативные хладагенты, основанные на эластокалорическом эффекте (ЭКЭ) [1, 2]. Заключается этот эффект в изменении температуры образца в адиабатических условиях при развитии МП под нагрузкой выше температуры конца обратного МП A_f , т.е. в условиях проявления сверхэластичности (СЭ).

Для изучения циклической стабильности ЭКЭ в циклах нагрузка/разгрузка выбраны сплавы на основе $Ni_{54}Fe_{19}Ga_{27}$ и микролегированного бором $(Ni_{54}Fe_{19}Ga_{27})_{99,7}B_{0,3}$, полученные методом направленной кристаллизации. Средний размер зерна в обоих кристаллах составляет 1–4 мкм. Методом EBSD показано, что наблюдается преимущественная ориентация зерен вдоль близких [012]- и [013]-направлений в сплавах $Ni_{54}Fe_{19}Ga_{27}$ и $(Ni_{54}Fe_{19}Ga_{27})_{99,7}B_{0,3}$ соответственно. Исследования проведены на кристаллах в исходном состоянии и после отжига при $T = 1373$ °K, 0,5 часов с закалкой в воду (отожженные).

Электронно-микроскопические исследования показали, что в обоих сплавах во всех состояниях, кроме исходного состояния в сплавах $Ni_{54}Fe_{19}Ga_{27}$, наблюдаются частицы вторичных фаз по границам зерен и в объеме зерна. Химический состав матрицы и γ -фазы различны: частицы значительно обогащены по Fe, обеднены по Ga. Калориметрические пики при исследовании температур МП сплавов $Ni_{54}Fe_{19}Ga_{27}$ и $(Ni_{54}Fe_{19}Ga_{27})_{99,7}B_{0,3}$ в отожженных состояниях размыты по сравнению с исходными кристаллами. Характеристические температуры МП представлены в таблице.

Исследование циклической стабильности СЭ и ЭКЭ в течение 100 в исходных и 500 циклов в отожженных кристаллах проводилось при комнатной температуре 298 К с заданной деформацией 4,5–5,5 % в рабочем цикле. Экспериментально показано, что отожженные кристаллы характеризуются низкими критическими напряжениями образования мартенсита σ_{Ms} порядка 77–90 МПа, что на 30–41 МПа меньше σ_{Ms} исходных кристаллов. Второй цикл по сравнению с первым сопровождается уменьше-

нием критических напряжений σ_{Ms} в исходных кристаллах на 6–9 МПа. В отожженных кристаллах в сплавах $Ni_{54}Fe_{19}Ga_{27}$ σ_{Ms} снижаются на 37 МПа, тогда как в сплавах $(Ni_{54}Fe_{19}Ga_{27})_{99,7}B_{0,3}$ значения σ_{Ms} остаются неизменными 90 МПа.

Температуры МП в сплавах $Ni_{54}Fe_{19}Ga_{27}$ и $(Ni_{54}Fe_{19}Ga_{27})_{99,7}B_{0,3}$

Сплавы	M_s , К	M_f , К	A_s , К	A_f , К	ΔT_{ad}^{exp} , К
Исходные $Ni_{54}Fe_{19}Ga_{27}$	268	261	269	275	6,4
Отожженные $Ni_{54}Fe_{19}Ga_{27}$	270	252	263	281	4,7
Исходные $(Ni_{54}Fe_{19}Ga_{27})_{99,7}B_{0,3}$	262	259	266	269	6,4
Отожженные $(Ni_{54}Fe_{19}Ga_{27})_{99,7}B_{0,3}$	241	231	242	251	5,4

Значения адиабатического охлаждения ΔT_{ad} при исследовании ЭКЭ на исходных кристаллах в обоих сплавах в течение 100 циклов составляют 6,4 К. Однако исследование поверхности образцов показало, что на поликристаллах сплава $Ni_{54}Fe_{19}Ga_{27}$ трещина наблюдается вдоль границы зерна, а в двухфазных $(Ni_{54}Fe_{19}Ga_{27})_{99,7}B_{0,3}$ кристаллах трещина образуется на тройных стыках и проходит через объём зерна. В то время как отожженные кристаллы в течение 500 циклов характеризуются стабильными параметрами ΔT_{ad} в сплавах $Ni_{54}Fe_{19}Ga_{27}$ и $(Ni_{54}Fe_{19}Ga_{27})_{99,7}B_{0,3}$ порядка 4,7 и 5,4 К соответственно. Поверхность кристалла отличается от исходных тем, что макротрещин по телу зерна не наблюдается.

Авторы выражают благодарность научному руководителю Панченко Е.Ю. и научному консультанту Чумлякову Ю.И. за организацию исследовательской работы и обсуждение полученных результатов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-19-00150, <https://rscf.ru/project/23-19-00150/>.

Литература

1. Bruno N.M., et al. Orientation dependence of the elastocaloric effect in $Ni_{54}Fe_{19}Ga_{27}$ ferromagnetic shape memory alloy // Physica Status Solidi (B) Basic Research. – 2018. – Vol. 255, № 2. – P. 1700437.
2. Masdeu F., et al. Superelastic behavior and elastocaloric effect in a $Ni_{51.5}Fe_{21.5}Ga_{27.0}$ ferromagnetic shape memory single crystal under compression // Materials Science and Engineering A. – 2022. – Vol. 833. – P. 142362.

ВЛИЯНИЕ ЛЕГИРОВАНИЯ ЖЕЛЕЗОМ НА ЦИКЛИЧЕСКУЮ СТАБИЛЬНОСТЬ СВЕРХЭЛАСТИЧНОСТИ В МОНОКРИСТАЛЛАХ СПЛАВА $\text{Co}_{35}\text{Ni}_{35}\text{Al}_{28}\text{Fe}_2$

И.Д. Фаткуллин, М.В. Жердева

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: fatkullin_92@mail.ru

Сплавы CoNiAl являются перспективными материалами для применения в таких областях, как авто-, космическая промышленность вследствие того, что проявляют сверхэластичность (СЭ) и эффект памяти формы (ЭПФ) за счет развития B2-L1_0 мартенситных превращений (МП) в широком температурном интервале [1]. Однако, из работ предыдущих лет известно, что путем легирования Fe трехкомпонентного сплава CoNiAl возможно увеличить энтропию смешения, что в свою очередь, может привести к уменьшению диффузных процессов при повышенных температурах, а также привести к улучшению термомеханической и циклической стабильности функциональных свойств [2]. Поэтому, целью работы является установить влияние легирования железом на циклическую стабильность СЭ при сжатии в монокристаллах сплава $\text{Co}_{35}\text{Ni}_{35}\text{Al}_{28}\text{Fe}_2$, ориентированных вдоль $[001]_{\text{B2}}$ -направления.

Монокристаллы выращивались методом Бриджмена. Образцы имели ось сжатия $[001]_{\text{B2}}$. Монокристаллы отжигались при температуре 1623K в течение 6 часов в трубке с гелием и закаливались от 1643K в раствор 10 % NaCl + 90 % H_2O .

Экспериментально установлено, что температуры начала прямого и конца обратного B2-L1_0 МП в монокристаллах $\text{Co}_{35}\text{Ni}_{35}\text{Al}_{28}\text{Fe}_2$ равны $M_s = (300 \pm 2)$ K и $A_f = (318 \pm 2)$ K, в свою очередь для $\text{Co}_{35}\text{Ni}_{35}\text{Al}_{30}$ температуры B2-L1_0 МП – $M_s = (356 \pm 2)$ K и $A_f = (379 \pm 2)$ K. Легирование железом 2 ат. % монокристаллов трехкомпонентного сплава CoNiAl приводит к уменьшению температур B2-L1_0 МП за счет твердо-растворного упрочнения, что соответствует данным полученным на поликристаллах [2].

Циклические испытания в циклах нагрузка/разгрузка $n=100$ проводились при температуре $T = 423$ K $> A_f$ в условиях заданной нагрузки 450 – 600 МПа. При таких параметрах в монокристаллах реализовывалась СЭ с большой обратимой деформацией за счет развития полностью обратимого МП под нагрузкой.

Легирование железом 2 ат. % монокристаллов трехкомпонентного сплава CoNiAl приводит к снижению эффекта первого цикла и, соответственно, улучшает циклическую стабильность СЭ. В монокристаллах

$\text{Co}_{35}\text{Ni}_{35}\text{Al}_{30}$ накапливается необратимая деформация до 2,0 % после циклических испытаний и значительная деградация параметров СЭ после первого цикла нагрузка/разгрузка. Такое поведение связано с образованием остаточного мартенсита и дислокаций в первом цикле, которые упрощают зарождение мартенсита в последующих циклах нагрузка/разгрузка [3]. Во втором цикле механический гистерезис уменьшается на 60 МПа, критические напряжения на 61 МПа и обратимая деформация на 0,4 %, относительно первого цикла. В последующих циклах нагрузка/разгрузка $n = 3 - 100$ параметры СЭ меняются не значительно в монокристаллах $\text{Co}_{35}\text{Ni}_{35}\text{Al}_{30}$. В свою очередь, в монокристаллах $\text{Co}_{35}\text{Ni}_{35}\text{Al}_{28}\text{Fe}_2$ необратимая деформация не накапливается и эффект первого цикла выражен слабо. Изменение параметров СЭ во втором цикле не превышает 15 % относительно первого цикла. Со 2 по 100 цикл параметры СЭ не изменяются и равны: критические напряжения $\sigma_{\text{кр}} = 295$ МПа, механический гистерезис $\Delta\sigma = 82$ МПа и обратимая деформация $\varepsilon_{\text{обр}} = 2,5$ %.

Таким образом, легирование Fe 2 ат. % монокристаллов CoNiAl способствует высокой циклической стабильности СЭ в течение 100 циклов нагрузка/разгрузка без деградации ее параметров. В отличие от монокристаллов $\text{Co}_{35}\text{Ni}_{35}\text{Al}_{30}$, где в результате циклических испытаний $n=100$ накапливается необратимая деформация до 2,0 % и после первого цикла наблюдаются значительные изменения параметров СЭ, связанные с образованием остаточного мартенсита и дислокаций.

Авторы выражают благодарность научному руководителю Панченко Е.Ю. и научному консультанту Чумлякову Ю.И. за организацию исследовательской работы и обсуждение полученных результатов. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-10093, <https://rscf.ru/project/23-79-10093/>

Литература

1. Zhou Y. [et al.] Phase Equilibria in the Al-Co-Ni Alloy System / J. Phase Equilib. Diffus. – 2017 – Vol. 38. – P. 630–645.
2. Luo F.H. [et al.] Influence of Fe on martensitic and magnetic transformation of p based Co-Ni-Al alloy / J. Funct. Mater. – 2005. – Vol. 36. – P. 1862–1865.
3. Efstathiou C. [et. al.] Fatigue response of NiFeGa single crystals / Scr. Mater. – 2007. – Vol. 57, Is. 5. – P. 409–412.

ПРИМЕНЕНИЕ ВЫСОКОДОЗОВОЙ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ КОРРОЗИОННЫХ СВОЙСТВ СТАЛИ ВНС-5

Е. Д. Хабибова

*Национальный исследовательский
Томский политехнический университет, Томск*

E-mail: edh2@tpu.ru

В областях промышленности, таких как авиастроение, станкостроение, машиностроение требуются коррозионностойкие стали, обладающие высокими механическими свойствами. Перспективной представляется внедрение сталей аустенитно-мартенситного класса, к которым относится ВНС-5 (13X15H4AM3). Известно, что детали машин, элементы жаропрочного крепежа для энергетического оборудования, силовые конструкций (болты, анкеры) изготавливаются из данной стали благодаря её высоким значениям ударной вязкости и пластичности. Долговечность конструкций и прочность материалов снижается за счёт действия факторов окружающей среды (температуры, влажности и концентрации окислителей). Так, в морских средах на поверхности материалов инициируются коррозионные процессы, приводящие к появлению очагов коррозии и, как следствие, понижающие срок службы изделий. Одним из способов защиты поверхности сталей от агрессивных коррозионных сред является обработка поверхностных слоёв ионным пучками средних энергий и/или химическая пассивация.

Цель данной работы заключается в определении коррозионных параметров и выявлении преимущественного типа коррозионных разрушений на поверхности стали ВНС-5, модифицированной методами химической пассивации (ХП) и высокодозовой ионной имплантации (ВДИИ).

Исследования проводили на подложках из стали марки ВНС-5 производства ФГУП «ВИАМ» (Москва, Россия). Предварительная пробоподготовка поверхности включала механическую шлифовку до зеркального блеска на SiC абразивах (P600, P1000, P1500, P2000, P2500). Одну партию образцов обрабатывали пучками ионов аргона и хрома со средней энергией ≤ 40 кэВ и дозой облучения $\sim 10^{17}$ ион/см² с использованием ионного источника на основе планарного магнетрона с инжекцией электронов. Образцы другой партии химически пассивировали в 10%-растворе H₃PO₄ с добавлением 0,05 М K₂Cr₂O₇ в течение 140 часов. Образцы ВНС-5 стали после химической пассивации – ВНС-5^{ХП}, после ионно-пучковой обработки – ВНС-5^{ВДИИ}, механически полированные – ВНС-5^{ИСХ}. Электрохимические эксперименты выполняли на потенциостате PalmSens-4 в трехэлектродной ячейке. Скорость развертки потенциала в режиме линейной поляризации составляла 1 мВ/с. Импедансные спектры получали

относительно потенциала разомкнутой цепи при амплитуде сигнала 10 мВ и частотах от 10^5 до 0,05 Гц. Все образцы исследуемой стали ВНС-5 имели форму цилиндров с площадью рабочей поверхности $\sim 0,75 \text{ см}^2$. Фоновым электролитом служил 3,5 (мас. %) раствор NaCl. Морфологию поверхности образцов ВНС-5 исследовали на растровом электронном микроскопе (РЭМ) Apreo 2 S (Thermo Fisher Scientific, США) при ускоряющем напряжении 20 кВ.

Диаграммы Найквиста и Бode (рис. 1) демонстрируют, что на поверхности исследуемых образцов протекают Фарадеевские процессы, характеризующиеся высокими значениями сопротивления переноса заряда (R_{ct}) и модуля импеданса $|Z|$. Эквивалентная схема, моделирующая диаграмму Найквиста (вставка к рис. 1б), содержит следующие элементы: сопротивление раствора (R_s), сопротивление переноса заряда (R_{ct}) и элемент постоянной фазы (CPE). Наибольшие значения $|Z|$ и R_{ct} наблюдаются для образцов ВНС-5^{ИСХ} и ВНС-5^{ВДИИ}, наименьшее – для ВНС-5^{ХП}. Это говорит о том, что оксидная плёнка, сформированная в результате ХП, обладает высокой удельной проводимостью, поэтому процессы переноса заряда в двойном электрическом слое оказываются облегченными.

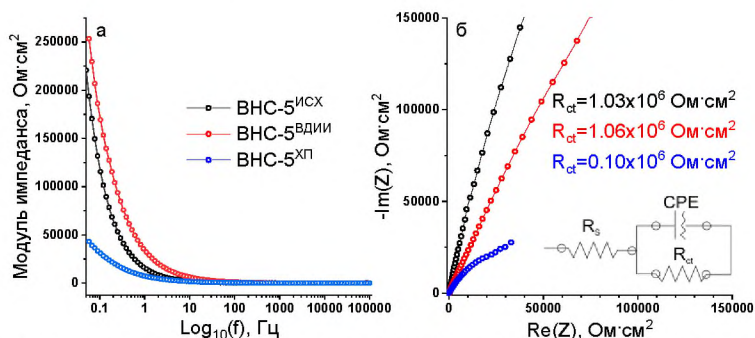


Рис. 1: а – диаграмма Бode; б – диаграмма Найквиста исходного и модифицированных образцов ВНС-5 в 3.5 (масс. %) растворе NaCl

Таким образом, наилучшими коррозионными свойствами обладает сталь ВНС-5^{ВДИИ}, предположительно, за счет формирования сплошной оксидной плёнки Cr_2O_3 с ярко выраженными диэлектрическими свойствами. Автор выражает благодарность научному руководителю Семину В.О. за организацию исследовательской работы и обсуждение полученных результатов. Исследование выполнены по теме государственного задания (проект № FSWW-2023-0008).

ИССЛЕДОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ИОНОВ МЕДИ ПО ОБЪЕМУ ДИФфуЗИОННО-ЛЕГИРОВАННОГО КРИСТАЛЛА НИОБАТА ЛИТИЯ

Ф.Н. Хайруллин, В.А. Ивасенко, И.Н. Кореньков

*Томский государственный университет
систем управления и радиоэлектроники, Томск*

E-mail: fedor.genzer@mail.ru

В настоящее время новую волну популярности получили устройства на базе кристаллов ниобата лития, что не в последнюю очередь обусловлено возможностью регулировки их оптических, фотопроводящих и фоточувствительных свойств за счёт легирования [1]. Одно из таких устройств, основанное на эффекте перераспределения электрических зарядов в легированных медью или железом кристаллах ниобата лития при их неоднородном освещении, называется фотовольтаическим пинцетом [2]. Легирование кристаллов ниобата лития медью может быть реализовано методом высокотемпературной диффузии [3].

Целью представленной работы является изучение распределения концентрации ионов меди Cu^+ и Cu^{2+} в объеме диффузионно- легированного кристалла ниобата лития, что необходимо для реализации фотовольтаического пинцета с его использованием.

В экспериментах использовался образец $\text{LiNbO}_3:\text{Cu}$, созданный диффузией меди из двух металлических пленок с толщиной 800 нм, нанесенных на X-границы пластины, имеющей размеры $1,33 \times 10,22 \times 12,42$ мм³ по осям x , y и z соответственно. Диффузия проводилась при температуре 600°C в течение 12 часов.

Распределение ионов меди в образце экспериментально определялось по зависимости показателей поглощения $k_{532}(x)$ и $k_{808}(x)$ от глубины x для лазерного излучения с длинами волн 532 и 808 нм. Предполагалось, что основной вклад в поглощение на этих длинах волн вносят ионы меди в зарядовых состояниях Cu^+ и Cu^{2+} соответственно. Полученные результаты представлены точками на рис. 1, а методика эксперимента по определению зависимостей показателя поглощения по глубине кристалла подробно описана в работе [3].

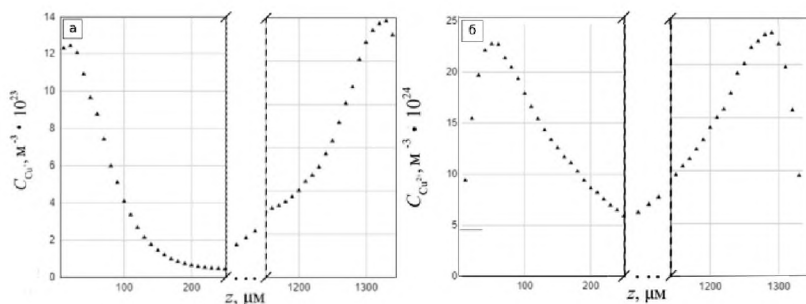


Рис. 1. Распределение концентрации ионов меди $C_{Cu^+}(x)$ и $C_{Cu^{2+}}(x)$ в диффузионно-легированном образце $LiNbO_3:Cu$

Таким образом, распределения концентрации меди в зарядовых состояниях Cu^+ и Cu^{2+} для исследованного образца $LiNbO_3:Cu$ характеризуются двумя пиками с максимумами, расположенными вблизи граней $x = 0$ и $x = 1,3$ мм.

Авторы выражают благодарность аспиранту Э. Комову за предоставление образца $LiNbO_3:Cu$ и научному руководителю А.А. Колмакову за организацию исследовательской работы и обсуждение полученных результатов. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках программы «Приоритет 2030».

Литература

1. Мамбетова К.М. и др. Агрегирование диэлектрических наночастиц на X-срезе кристалла $LiNbO_3:Cu$ электрическими полями фоторефрактивных голограмм // Известия вузов. Физика. – 2019. – Т. 62, № 4 (736). – С. 89–93.
2. Carrascosa M. et al. $LiNbO_3$: A photovoltaic substrate for massive parallel manipulation and patterning of nano-objects // Applied Physics Reviews. – 2(4).
3. Колмаков А.А. и др. Агрегирование диэлектрических наночастиц фотовольтаическими полями, создаваемыми одномерным гауссовым пучком над поверхностью микроструктуры $LiNbO_3:Cu$ неполярного X-среза // Труды школы-семинара «Волны-2022». Когерентная и нелинейная оптика. – 2021. – С. 58.

МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ОБРАЗЦОВ СПЛАВА TiNi ДО И ПОСЛЕ ДВУХСТОРОННИХ ИОННО- И ЭЛЕКТРОННО-ПУЧКОВЫХ ОБРАБОТОК ПОВЕРХНОСТИ

Д.В. Чепелев, В.В. Лобань

Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск

E-mail: danielchep@inbox.ru

Сплавы на основе никелида титана (сплавы TiNi) с эффектами памяти формы и сверхэластичности (ЭПФ-СЭ) широко используются для изготовления миниатюрных изделий медицинского и немедицинского назначения [1]. Известно [2], что поверхностное легирование сплавов TiNi способствует повышению их физико-механических свойств. Так, модифицировать поверхность сплавов TiNi, без критического влияния на интегральные физико-механические характеристики, можно с использованием ионно- и электронно-пучковых обработок. Тем не менее, не установлено, какое влияние оказывает модифицированный поверхностный слой на деформационное поведение сплава TiNi при механических испытаниях на трехточечный изгиб. Цель работы – исследовать влияние двухсторонних ионно- и электронно-пучковых обработок поверхности на деформационное поведение сплава TiNi при испытаниях на трёхточечный изгиб.

В работе исследованы TiNi-образцы (сплав ТН-1) в виде прямоугольных пластин ($120 \times 10 \times 1,3$ мм), которые были вырезаны методом электроэрозионной резки из горячекатаного листового проката. Этапы подготовки поверхности: 1) – механическая обработка на виброгалтовке SP-A12 (Carlo De Giorgi, Италия) в наполнителе (фарфоровые цилиндры ZSP 3/5 (ОТЕС, Германия)) в течение ~100 часов. Образцы и наполнитель промывали через ~50 часов в ацетоне, затем в воде; 2) – ультразвуковая очистка поверхности (УЗО) в УЗВ-5,7 ТТЦ (Сапфир, Россия) с дистиллированной водой при $T \approx 298$ К, в течение $t = 30$ мин; 3) – электролитическая полировка (3 ч. $\text{CH}_3\text{COOH} + 1$ ч. HClO_4), время полировки t от ~5 до ~10 с., величина силы тока и напряжения $I \approx 1$ А, U от ~15 до ~20 В, температура водно-ледяной смеси $T \approx 278$ К; 4) – УЗО поверхности в УЗВ-5,7 ТТЦ (Сапфир, Россия) с дистиллированной водой при $T \approx 373$ К, в течение $t = 30$ мин.

Электронно-пучковую обработку низкоэнергетическим сильноточным электронным пучком (НСЭП) проводили на модернизированной установке «РИТМ-СП» (ООО «Микросплав», Россия) в следующем режиме: плотность энергии пучка $E_s = 3,8$ Дж/см², число импульсов $n = 10$. Ионно-пучковую обработку выполняли с применением источника ионов на ос-

нове вакуумного дугового разряда Mevva 5.Ru и катода из тантала марки ТВЧ чистотой 99,7 масс. % (ООО «Гирмет», Россия) при дозе облучения $D = 5,0 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$ и ускоряющем напряжении $U = 30 \text{ кэВ}$. Поверхностный сплав на основе Ti-Ni-Ta синтезировали на установке «РИТМ-СП» путем чередования операций напыления пленки на TiNi подложку и последующего импульсного плавления и жидкофазного перемешивания системы пленка-подложка. На поверхность TiNi-образцов магнетронным методом, осаждали пленку химического состава $\text{Ti}_{60}\text{Ta}_{40}$ (ат. %) толщиной $\sim 100 \text{ нм}$. Жидкофазное перемешивание выполняли с помощью НСЭП ($E_s = 2 \text{ Дж/см}^2$, $n = 10$). Число N циклов синтеза (осаждения-плавления) повторяли 2 раза. Таким образом, ожидаемая эффективная толщина синтезированного ПС составляла $\sim 200 \text{ нм}$.

Испытания на трёхточечный изгиб проводили на машине серии «GP 30 DLC-0,5» («Devotrans», Турция) при температуре $298 \pm 1 \text{ К}$, скорости нагружения $\sim 0,5 \text{ мм/мин}$, до величины максимального перемещения траверсы равного $\sim 18 \text{ мм}$. Накапливаемую и возвращаемую деформацию фиксировали в виде кривых «нагрузка F – перемещение траверсы ω », которые далее перестраивали в зависимости «напряжение σ – деформация ε ». На каждый тип обработки к испытаниям на трёхточечный изгиб подвергали по 3 образца.

В результате исследований обнаружено, что двухсторонние ионно- и электронно-пучковые обработки поверхности образцов сплава TiNi приводят к понижению напряжений в зонах накопления упругой и мартенситной деформаций. Электронно-микроскопический анализ показал сохранение сплошности модифицированных слоёв к TiNi-подложке при квазистатическом нагружении изгибом.

Авторы выражают благодарность научным сотрудникам ЛМПиН ИФПМ СО РАН г.н.с., д.ф.-м.н., профессору Мейснер Л.Л. и н.с., к.т.н. Дьяченко Ф.А. за организацию исследовательской работы и обсуждение полученных результатов. Исследования выполнены в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, проект FWRW-2021-0003.

Литература

1. Mehrpouya M. MEMS applications of NiTi based shape memory alloys: a review / M. Mehrpouya, H.C. Bidsorkhi // Micro Nanosyst. – 2016. – Vol. 8. – P. 79–91.
2. Yan C. [et al.] Enhanced surface hardness and tribocorrosion performance of 60NiTi by boron ion implantation and post-annealing // Tribol. Int. – 2021. – Vol. 155. – P. 106816(1–11).

ПЛАЗМОННЫЕ КРАСКИ НА ОСНОВЕ ОСТРОВКОВЫХ ПЛЕНОК АЛЮМИНИЯ И ДРУГИХ МЕТАЛЛОВ

Д.К. Шарипова

Казанский (Приволжский) федеральный университет, г. Казань

E-mail: 2001dinulla@gmail.com

В последнее время значительно возрос интерес к созданию легких цветных покрытий, поскольку большинство химических красителей токсичны и выцветают со временем. На помощь приходят структурные краски, которые обладают преимуществами, такими как высокая интенсивность цвета и устойчивость к химическим реагентам.

В статье [1] был разработан субволновой плазмонный резонатор, который предлагает платформу для создания ярких структурных цветов, не зависящих от угла и поляризации падающего света. При падении света свободные электроны металла начинают резонансно колебаться в пределах геометрии наночастиц. Изменяя геометрические параметры структуры, можно настроить оптический отклик по всему видимому спектру для формирования полноцветной гаммы.

В работе описано изготовление такой структурной краски на основе островковых пленок алюминия, полученных на сверхвысоковакуумной установке для синтеза и анализа ультратонких пленок (SPECs, КФУ). На первом этапе наносилось зеркало из алюминия (100 нм) методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложку Si (111). Вторым этапом осаждался оксид алюминия (10 нм) методом реактивного магнетронного распыления. Третьим этапом, контролируемым образом формировались самосборные частицы алюминия методом молекулярно-лучевой эпитаксии. Для формирования островков алюминия подложка была нагрета до 200°C. Каждый образец покрывался слоем оксида алюминия (10 нм).

Был проведен ряд экспериментов: изменяя время осаждения алюминия третьего этапа, были получены частицы размеров 3, 4, 6, 8 нм. В результате были получены краски разных цветов. Для получения зеленых оттенков использовались многослойные плазмонные наночастицы. Введение двух дополнительных геометрических параметров позволило получить покрытия зеленого оттенка. Все пленки были исследованы на эллипсометре, на котором были получены спектры отражения в диапазоне длин волн 300–2000 нм.

Литература

1. Cencillo-Abad P. et al. Ultralight plasmonic structural color paint // Science Advances. – 2023. – Vol. 9, № 10. – С. eadf7207.

АНАЛИЗ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ ПОВЕРХНОСТНЫХ Ti-Ni-Ta СПЛАВОВ, СФОРМИРОВАННЫХ НА ПОДЛОЖКАХ ИЗ TiNi И ВТ6 ЭЛЕКТРОННО-ПУЧКОВЫМ МЕТОДОМ

С.И. Южакова^{1,2}

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск

E-mail: sofayjakova@gmail.com

Титановые сплавы широко востребованы в различных областях промышленности и медицины [1, 2]. Высокая стоимость титана препятствует распространению его использования. Существует потребность в увеличении долговечности сплавов. Один из методов, который является перспективным для решения этой проблемы – метод модификации поверхности с применением электронно-пучковых обработок. Однако обработка электронным пучком может вызывать остаточные напряжения, которые связаны со структурно-фазовыми изменениями, происходящими в материале в зоне непосредственного воздействия и в прилегающих к ней областях материала. Целью работы является анализ влияния электронно-пучковых обработок с многокомпонентным легированием поверхностного слоя на фазовый состав, структуру и остаточные упругие напряжения поверхностных слоев. На рентгенограммах исходных образцов TiNi (рис. 1а) присутствует фаза В2 (~95 об. %) и небольшое количество фазы Ti₂Ni (~ 5 об. %). На рентгенограммах образцов после синтеза поверхностного сплава (ПС) на основе Ti-Ta (рис. 1б) наряду с линиями В2 фазы, появляются высокоинтенсивные рефлексы, соответствующие кубической фазе α -Ta и низкоинтенсивные рефлексы от мартенситной моноклинной фазы В19'(TiNi). Выявлено, что в образцах TiNi синтез ПС привел к формированию в подложке значительных остаточных сжимающих в направлении, перпендикулярном к поверхности облучения напряжений 1 рода $\sigma_{\perp}^I \approx -440$ МПа.

На рентгенограммах образцов ВТ6 до (рис. 1в) и после синтеза ПС на основе Ti-Ta наблюдаются рефлексы основной α – Ti фазы. В результате синтеза ПС в образцах ВТ6 возникают дополнительные рефлексы, соответствующие мартенситной α'' -фазе, а рефлексы основной α -фазы смещаются в область больших углов (рис. 1г). Смещение рефлексов указывает на наличие остаточных упругих напряжений.

Оценка остаточных напряжений 1 рода показала их высокий уровень, соответствующий значениям $\sigma_{\perp}^I \approx -409$ МПа.

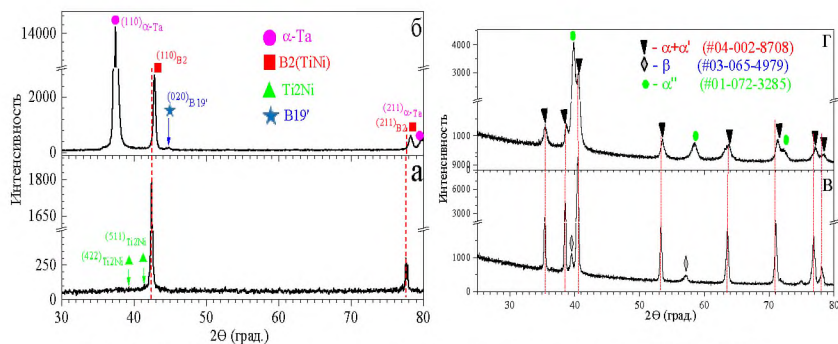


Рис. 1. Дифракционные картины для образцов сплавов TiNi и VT6:
а – исходный TiNi; б – TiNi после синтеза ПС; в – исходный VT6;
г – VT6 после синтеза ПС. Симметричная схема съемок, Cu-излучение

Таким образом, установлено, что синтез ПС на основе Ti-Ta привел к изменению структуры поверхностного слоя подложек из TiNi и VT6, а также к формированию значительных остаточных напряжений.

Автор выражает благодарность своему научному руководителю к.ф.м.н. Остапенко М.Г., н.с. ИФПМ СО РАН, за помощь в планировании и проведении экспериментов, ценные советы при анализе результатов и их обсуждении. Работа поддержана Российским научным фондом (проект № 24-22-00080).

Литература

1. Lai-Chang Zhang, Liang-Yu Chen. A Review on Biomedical Titanium Alloys: Recent Progress and Prospect // Advanced Engineering Materials. – 2019. – Vol. 21, Is. 4.
2. Paramjit Singh, Harish Pungotra, Nirmal S. Kalsi. On the characteristics of titanium alloys for the aircraft applications // Materials Today: Proceedings. – 2017. – Vol. 4, Is. 8. – P. 8971–8982.

ЦИКЛИЧЕСКАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ ОБРАТИМОЙ ДЕФОРМАЦИИ В СОСТАРЕННЫХ ПОД НАГРУЗКОЙ В МАРТЕНСИТЕ МОНОКРИСТАЛЛАХ CoNiAl

Э.И. Янушоните, И.Д. Курлевская

*Национальный исследовательский
Томский государственный университет, Томск*

E-mail: yanushonite98@mail.ru

Увеличение температурного интервала восстановления неупругой деформации при нагрузке/разгрузке является актуальной проблемой для сплавов с памятью формы. Эффективным способом для расширения температурного интервала обратимой деформации в циклах нагрузка/разгрузка в данных сплавах является старение под нагрузкой в мартенситном состоянии (СМН) за счет создания условий для переориентации мартенсита [1]. Цель данной работы заключается в исследовании влияния СМН на развитие обратимой деформации при сжатии в циклах нагрузка/разгрузка при различных температурах испытания и изучение ее циклической стабильности в монокристаллах $\text{Co}_{35}\text{Ni}_{35}\text{Al}_{30}$.

В работе исследованы монокристаллы ферромагнитного сплава $\text{Co}_{35}\text{Ni}_{35}\text{Al}_{30}$ (ат %). Термомеханическая обработка образцов заключалась в гомогенизации при 1623 К в течение 8,5 ч и закаливании в воду комнатной температуры с последующим СМН при температуре 423 К, 0,5 ч под сжимающей нагрузкой 500 МПа, приложенной вдоль $\langle 110 \rangle_{\text{B2}}$ -направления. Дальнейшие исследования проводили вдоль $[001]_{\text{B2}}$ -направления.

На СМН монокристаллах $\text{Co}_{35}\text{Ni}_{35}\text{Al}_{30}$ реализуется двусторонний эффект памяти формы с растягивающей обратимой деформацией $+7 (\pm 0,3)$ % вдоль $[001]_{\text{B2}}$ -направления при температурах $M_s = 335$ К, $M_f = 255$ К и $A_s = 290$ К, $A_f = 360$ К, где при термоиндуцированном охлаждении решетка B2-аустенита переходит в ориентированный вариант L1₀-мартенсита, стабилизированный при СМН.

В мартенситном состоянии от $203 \text{ К} < T_t < M_f$ в СМН монокристаллах $\text{Co}_{35}\text{Ni}_{35}\text{Al}_{30}$ в циклах нагрузка/разгрузка вдоль $[001]_{\text{B2}}$ -направления за счет переориентации вариантов L1₀-мартенсита V1–V2/V3 без развития мартенситных превращений (МП) реализуется ферроэластичность (ФЭ), характеризующаяся узким механическим гистерезисом $\Delta\sigma_{\text{Fe}} = 13\text{--}23$ МПа, низкими критическими напряжениями $\sigma_{\text{Fe}} = 20\text{--}38$ МПа и величиной обратимой деформации до 12 %.

С увеличением температуры испытания в интервале $M_f < T_t < A_f$ на кривых нагрузка-деформация наблюдается две стадии. Первая стадия связана с развитием обратного L1₀(V1) – B2 МП под нагрузкой и прямого

B2–L1₀(V1) МП при разгрузке. Данная стадия характеризуется низкими критическими напряжениями $\sigma_{cr1} \leq 25$ МПа, узким механическим гистерезисом $\Delta\sigma_1 \leq 19$ МПа и полностью обратимой деформацией до 6 %. Вторая стадия связана с развитием классического B2–L1₀(V2/V3) МП под нагрузкой, т.е. сверхэластичность.

Наибольший практический интерес представляет первая стадия в интервале температур от $M_f < T_t < A_f$, так как характеризуется полностью обратимой деформацией, низкими напряжениями и узким гистерезисом. Это способствует высокому коэффициенту производительности $COP = 67,8$ [001]_{B2}-монокристаллах Co₃₅Ni₃₅Al₃₀ после СМН и высокой циклической стабильности первой стадии кривых нагрузка-деформация. Исследование циклической стабильности обратимой деформации на первой стадии кривой $\sigma(\epsilon)$ проводили до заданной деформации 5,5 % при $T_t = 343$ К. В течение 100 циклов нагрузка/разгрузка обратимая неупругая деформация остается неизменной 3,5–4 %, наблюдаются флуктуации экспериментальных значений критических напряжений от 8 до 11 МПа и механического гистерезиса от 1 до 4 МПа в пределах погрешности измерений.

Таким образом, на СМН монокристаллах Co₃₅Ni₃₅Al₃₀ вдоль [001]_{B2}-направления при сжатии в интервале $203 \text{ K} < T_t < M_f$ реализуется обратимая деформация в мартенситном состоянии до 12 % с узким механическим гистерезисом 23 МПа и низкими критическими напряжениями $\sigma_{re} = 20\text{--}38$ МПа. В интервале $M_f < T_t < A_f$ развитие обратного при нагрузке и прямого при разгрузке L1₀(V1)–B2 МП на первой стадии кривых $\sigma(\epsilon)$ сопровождается полностью обратимой деформацией до 6 % с высокой циклической стабильностью в течение 100 циклах нагрузка/разгрузка за счет низких значений сил трения для движения двойниковых границ в мартенсите 1–4 МПа.

Автор выражает огромную благодарность научному руководителю Панченко Е.Ю. и научному консультанту Чумлякову Ю.И. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-10093. <https://rscf.ru/project/23-79-10093/>

Литература

1. Otsuka K. Mechanism of martensite aging effects and new aspects / K. Otsuka, X. Ren // Mater. Sci. Eng. A. – 2001. – Vol. A312. – P. 207–218.
2. Elena Y. Panchenko [et. al.]. Effect in Aged Single Crystals of Ni₅₄Fe₁₉Ga₂₇ Ferromagnetic Shape Memory Alloy // Metals – 2022. – Vol. 12. – P. 1398.

Научное издание

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

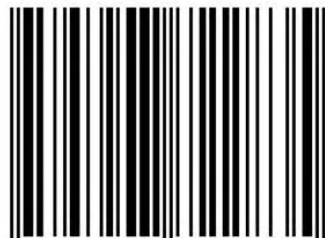
Сборник материалов XIX Российской студенческой конференции,
посвященной 85-летию кафедры физики твёрдого тела
физического факультета ТГУ
(13–17 мая 2024 г.)

Оригинал-макет А.А. Цыганкова
Дизайн обложки: М.В. Жердева, Л.Д. Кривцова

Подписано к печати 05.06.2024 г.
Формат 60×84¹/₁₆. Бумага для офисной техники.
Гарнитура Times. Печ. л. 8,3. Усл. печ. л. 7,6.
Тираж 500 экз. Заказ № 5928

Отпечатано на оборудовании
Издательства Томского государственного университета
634050, г. Томск, пр. Ленина, 36
Тел. 8+(382-2)–52-98-49
Сайт: <http://publish.tsu.ru>
E-mail: rio.tsu@mail.ru

ISBN 978-5-907722-83-5



9 785907 722835 >