



РОСЖЕЛДОР
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Ростовский государственный университет путей
сообщения»
(ФГБОУ ВО РГУПС)

Научно-техническая библиотека

**КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ
ПРОЧНОСТИ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ТЕЛ**
тематический обзор научной литературы

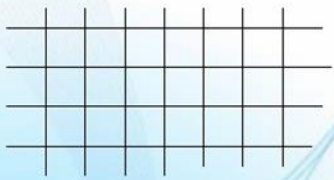
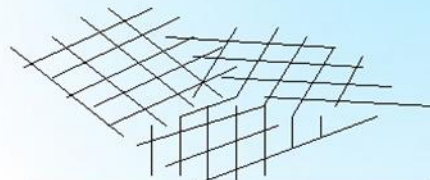
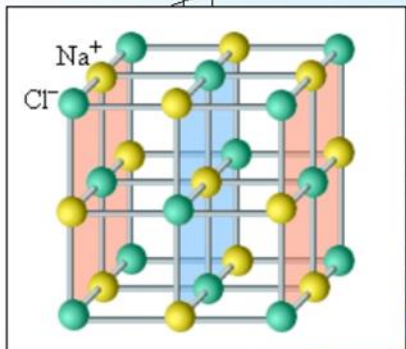


Ростов-на-Дону
2022

Составитель: О. В. Кавецкая, ведущий библиотекарь НТБ

Исследование природы химической связи является центральной проблемой всей теоретической химии. Изучение строения и реакционной способности вещества дает богатую информацию о характере взаимодействия между атомами в молекуле, способствуя все более углубленному моделированию химических процессов. Обобщение экспериментальных данных приводит на определенных этапах развития химии к теоретическим концепциям, которые наряду с чисто познавательным аспектом имеют и громадное практическое значение, так как позволяют вести исследование более целенаправленно. Однако только с созданием аппарата квантовой механики — науки о движении микрочастиц (атомов, ядер, электронов и т. д.) — ранее существовавшие теории химической связи получили естественное объяснение. Современная квантовая химия является частью квантовой механики, в основе которой лежит представление о корпускулярно-волновом дуализме микрочастиц.

Кристаллические тела

<h3>монокристаллы</h3>  <p style="text-align: center;">Анизотропия – зависимость физических свойств от направления внутри кристалла.</p>	<h3>поликристаллы</h3>   <p style="text-align: center;">Кристаллическая решетка поваренной соли</p>
--	---

1. Аверченков В. И. Технологическое обеспечение качества и срока эксплуатации тяжело нагруженных деталей при использовании на финишных операциях поликристаллических св алмазов / В. И. Аверченков, В. В. Надуваев, Е. Н. Фролов. – Текст : электронный // Обеспечение и повышение качества изделий машиностроения и

авиакосмической техники : сб. материалов Международной научно–технической конференции / Брянский государственный технический университет. – Брянск, 2020. – С. 271–275 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Рассмотрены возможности эффективного использования поликристаллических СВ–алмазов при правке абразивных кругов, применяемых для различных видов шлифования.

2. Архангельский С. И. Статистический анализ параметров и функций распределения по размерам зерен однофазных поликристаллических материалов / С. И. Архангельский, Д. М. Левин. – Текст : электронный // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. — 2020. – Т. 86. – № 4. – С. 39–45 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Статистический анализ распределения по размерам зерен необходим как для построения и развития теории роста зерен и формирования микроструктуры, так и для описания размерных зависимостей характеристик физико–механических свойств поликристаллических материалов. Распределение по размерам зерен – одна из важнейших характеристик однородности структуры и, следовательно, стабильности свойств изделий в процессе эксплуатации. Представлены результаты исследования однофазной и равноосной поликристаллической микроструктуры с помощью статистического моделирования методом Монте–Карло параметров и функций распределения по размерам зерен. Приведены статистические параметры (средние значения, дисперсии, коэффициенты вариации) и функции распределения характеристик зеренной микроструктуры. Установлено, что функция распределения эффективных размеров зерен для исследованной модели поликристалла наиболее адекватно описывается γ –распределением. Его следует использовать при анализе экспериментальных функций распределения по размерам зерен однофазных поликристаллических материалов с равноосными зернами. Показано, что в качестве статистически обоснованной и достоверной оценки среднего размера зерен можно принять генеральное среднее (математическое ожидание) эффективных размеров (проеccionных диаметров) зерен с функцией γ –распределения, параметры которой должны быть предварительно определены при исследовании зеренной структуры поликристаллического материала. Полученные результаты статистического моделирования подтверждены экспериментальными данными металлографического анализа микроструктур модельных и промышленных материалов с различной степенью неоднородности зеренной структуры.

3. Афонин Н. Н. Реакционная взаимодиффузия компонентов в нестехиометрической двухслойной системе поликристаллических оксидов титана и кобальта / Н. Н. Афонин, В. А. Логачева // Конденсированные среды и межфазные границы. — 2020. – №4. – С. 430. — Текст : электронный // ЭБС Лань.

Поликристаллы



Показана возможность использования математической формы теории Даркена, применённой к описанию эффекта Киркендалла в бинарных системах, к описанию реакционной взаимодиффузии в нестехиометрических поликристаллических плёночных оксидных системах с ограниченной растворимостью. Цель работы – моделирование реакционной взаимодиффузии в условиях вакуумного отжига тонкоплёночной системы, состоящей из двух нестехиометрических поликристаллических оксидов титана и кобальта. Нестехиометрический характер системы предполагает наличие в ней подвижных компонентов – свободных межузельных катионов кобальта и титана. Фазообразование происходит в результате реакционной взаимодиффузии и захвата подвижных компонентов системы на межзёрненных ловушках. Предложенный механизм описывает распределённое по глубине системы образование фаз сложных оксидов. Использовалась комплексная методика эмпирического исследования, содержащая методы Резерфордского обратного рассеивания, рентгенофазового анализа и моделирования. Значения характеристических параметров процесса определялись путем численного анализа полученных экспериментально концентрационных распределений компонентов в рамках разработанной модели. При вакуумном отжиге тонкоплёночной двухслойной системы нестехиометрических оксидов $\text{TiO}_{2-x}\text{Co}_{1-y}\text{O}$ в диапазоне температур $T = 773\text{--}1073$ К определены значения индивидуальных коэффициентов диффузии кобальта $D_{\text{Co}} = 5.1 \cdot 10^{-8} \cdot \exp(-1.0 \text{ эВ}/(kT)) \text{ см}^2/\text{с}$ и титана $D_{\text{Ti}} = 1.38 \cdot 10^{-13} \cdot \exp(-0.31 \text{ эВ}/(kT)) \text{ см}^2/\text{с}$. Показано, что при $T = 1073$ К происходит фазообразование CoTiO_3 ромбоэдрической модификации.

Протяжённость области фазообразования сложных оксидов кобальта и титана увеличивается с ростом температуры вакуумного отжига и при 1073 К становится соизмеримой с общей толщиной плёночной системы. Модель позволяет прогнозировать концентрационные распределения компонентов по глубине многослойных нестехиометрических систем, в которых возможна реакционная взаимодиффузия.

4. Бутенко В. И. Структура и потенциал трибоконтакта поликристаллических материалов : монография / В. И. Бутенко. – Ростов–на–Дону : Донской государственный технический университет. — 2018. — 160 с. — ISBN 978–5–7890–1533–9. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART.

Рассмотрены явления, происходящие в зоне контакта взаимодействующих поверхностей деталей трибосистем различной физической природы и исследовано влияние структуры и физико–механического состояния материала поверхностного слоя на величину электропотенциала, возникающего в контактной зоне при трении. Показано, что определяющим фактором процесса трения поликристаллических материалов является потенциал трибоконтакта, раскрывающий физический смысл коэффициента трения и интенсивность изнашивания контактируемых материалов. Сведения, приведённые в монографии, будут полезны специалистам машиностроительных предприятий и организаций, занимающимся вопросами повышения работоспособности и надёжности деталей машин.

5. Влияние поликристаллической структуры на динамическую прочность и характер разрушения материала в различных зонах сварного соединения алюминиевого сплава / Р. Р. Балохонов, В. А. Романова, М. В. Сергеев. – Текст : электронный // Известия высших учебных заведений. Физика. — 2020. – Т. 63. – № 5(749). – С. 10–18 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Исследованы процессы локализации деформации и разрушения в ядре и зоне термомеханического влияния сварного шва сплава Al6061–T6, полученного трением с перемешиванием. Динамические краевые задачи решались численно методом конечных разностей. Разработаны процедура генерации упорядоченных и неупорядоченных поликристаллических структур, экспериментально наблюдаемых в различных зонах шва, а также физически обоснованное релаксационное определяющее уравнение для описания динамической термомеханической реакции алюминиевого сплава. Проведены расчеты растяжения поликристаллов. Исследовано влияние степени упорядоченности структуры и скорости деформирования на характер разрушения и прочность материала.

6. Влияние типа кристаллической решетки металлов на структурообразование и механические свойства при пластической деформации сдвигом / А. Г. Рааб, Н. К. Цнев, И. С. Кодиров [и др.]. – Текст : электронный // Металловедение и термическая обработка металлов. — 2021. – № 9(795). – С. 27–31 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Исследованы механические свойства и структурное состояние после деформации стали 10 (ОЦК), меди М1 (ГЦК) и титана Grade 4 (ГПУ) с использованием метода свободного кручения цилиндрических заготовок при температурах ниже температуры рекристаллизации. В металле формируется градиентное распределение деформации с максимальным уровнем значений в поверхностных слоях, что способствует интенсивному измельчению структуры и упрочнению. ОЦК– и ГЦК–решетки металлов обеспечивают более интенсивное измельчение, формируя развитую субструктуру по дислокационному механизму, а ГПУ–решетка реагирует преимущественно двойникованием. Прочность деформированного металла с градиентной структурой на 8 – 17 % выше по сравнению с исходным состоянием.



7. Волегов П. С. Многоуровневая модель для описания неупругого деформирования поликристаллов с учетом эволюции поврежденности / П. С. Волегов, Н. В. Котельникова, К. А. Курмоярцева. – Текст : электронный // XII Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики : сб. тр. : в 4–х т. – Уфа, 2019. – С. 593–595 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Рассматривается задача построения физически обоснованной модели для описания неупругого деформирования поликристаллических тел в условиях интенсивных неупругих деформаций с учетом механизмов

формирования и эволюции микроповреждений. Предложена структура математической модели, рассмотрен механизм формирования микротрещин путем объединения дислокаций в головной части скопления, поджатого на препятствии, предложены геометрические параметры формирующейся микротрещины. Приведены основные соотношения, описывающие процесс деформирования на мезоуровне с учетом плотности дислокаций и микротрещин.

8. Гаврилова В. Е. Механические свойства нанокристаллических материалов / В. Е. Гаврилова, А. Е. Гаврилова. – Текст : электронный // В мире научных открытий : сб. материалов IV Международной студенческой научной конференции. – Ульяновск: Ульяновский государственный аграрный университет им. П.А. Столыпина. — 2020. – С. 83–86 // НЭБ eLIBRARY.ru.

В статье рассматриваются механические свойства нанокристаллических материалов, их особенности и зависимость показателей друг от друга.

9. Горденчук В. Д. Поиск оптимальных параметров случайного распределения ориентации кристаллитов для получения максимальных упругих деформаций / В. Д. Горденчук. – Текст : электронный // XLV Гагаринские чтения : сб. трудов Международной молодежной научной конференции. Секция "Механика и моделирование материалов и технологий" / Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского Российской академии наук. – Москва, 2019. – С. 55–57 // НЭБ eLIBRARY.ru.

В ходе работы рассмотрены основы физики твердого тела, основные определения, такие как анизотропия физических свойств, текстура; поставлена и решена оптимизационная задача с использованием двухуровневой модели неупругого деформирования ГЦК поликристалла.

10. Губернаторов В. В. Формирование рельефа на свободной поверхности металлических поликристаллов при рекристаллизационном отжиге / В. В. Губернаторов, Т. С. Сычева, В. П. Пилюгин. – Текст : электронный // Физика металлов и металловедение. — 2019. – Т. 120. – № 2. – С. 155–160 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Предложен механизм формирования сложного рельефа, впервые обнаруженного на поверхности рекристаллизованного вольфрама в работах Беляевой А.И. с соавторами. Его суть состоит в деформации границ и приграничных объемов кристаллитов (зерен) в приповерхностном слое поликристаллического металла при охлаждении после выдержки при высокой температуре, которая обусловлена разницей пределов прочности и коэффициентов теплового расширения границ и тела зерен. При охлаждении металла из-за разницы в сокращении размеров границ и тела зерен в приповерхностном слое возникают трещины (канавки) на границах, по берегам которых образуются одинаковые гребни. Изгиб границы делает профиль канавок асимметричным и создает перед гребнями неглубокие

складки. Поверхностный рельеф ухудшает эксплуатационные свойства металлов, но его образование можно предотвратить, если в результате рекристаллизации изделие становится монокристаллическим.

11. Давыдов А. П. Координатная волновая функция двух фотонов в запутанном состоянии на выходе из нелинейного кристалла / А. П. Давыдов, Т. П. Злыднева. – Текст : электронный // Инженерная физика. — 2021. – № 12. – С. 22–28 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Конструируется волновая функция в координатном представлении двух запутанных фотонов в состоянии на выходе из нелинейного кристалла путем моделирования векторов поляризации и применения гауссовского импульсного распределения для каждого из фотонов.

12. Дмитриев А. В. Определение размеров блоков мозаики и анизотрии чешуек искусственного графита по магнетосопротивлению / А. В. Дмитриев, А. А. Ершов. – Текст : электронный // Математическое моделирование. — 2020. – Т. 32. – № 1. – С. 100–110 // НЭБ eLIBRARY.ru.

В статье приведены результаты математического моделирования протекания электрического тока в пластинчатом поликристалле графита в магнитном поле. В отличие от простой модели с учетом только контактного сопротивления между чешуйками, в настоящей модели также учтено омическое сопротивление вдоль и поперек слоёв графита на основе цепочечной модели протекания электрического тока в поликристалле графита. В результате получена формула с уточненными поправочными коэффициентами, которая позволяет подобрать параметры поликристалла для расчета температурной зависимости УЭС и магнетосопротивления. Проведено сравнение с простой моделью, учитывающей только контактное сопротивление, различие составляет до 50 % от прежней оценки. Отличие отнесено к особенностям подключения отдельных кристаллов в поликристалле. Это позволяет анализировать размеры кристаллов и их подключения в искусственном графите исходя из электрофизических свойств.

13. Ершов Н. В. Закономерности формирования атомной структуры магнитомягких железокремнистых сплавов : автореферат диссертации на соискание ученой степени. доктора физико–математических наук : специальность Физика конденсированного состояния / Н. В. Ершов ; Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук. – Екатеринбург, 2019. – С. 46–48. – Текст : электронный // ЭБ РНБ.

Актуальность темы диссертации сводится к тому, что: • несмотря на то, что на момент начала работы над диссертацией имелись некоторые основанные на косвенных наблюдениях представления о природе наведенной магнитной анизотропии в железокремнистых сплавах в кристаллическом и нанокристаллическом состояниях, не было прямых надежно обоснованных данных об их атомной структуре, закономерностях

ее формирования и ее изменениях под воздействием магнитного поля или механического напряжения при отжиге.

Тема диссертации полностью соответствует нескольким пунктам Перечня критических технологий Российской Федерации, утвержденных Указами Президента РФ в 2002, 2006 и 2011 годах, таким как «Металлы и сплавы со специальными свойствами» (2002), «Нанотехнологии и наноматериалы» и «Технологии создания и обработки кристаллических материалов» (2006), «Технологии получения и обработки функциональных наноматериалов» (2011).

Исследования по теме диссертации выполнены в лаборатории микромагнетизма Института физики металлов УрО РАН в рамках комплексных бюджетных тем: 1 – «Природа одноосной анизотропии и способы формирования свойств магнитомягких ферромагнетиков при внешних воздействиях» («Одноосность», № гос. регистрации 01.200103143 (2001 – 2003)); 2 – «Магнитные структуры, спиновый транспорт и методы направленной модификации физических свойств в функциональных магнитных материалах на основе металлических и полупроводниковых гетероструктур, интерметаллических и металлических соединений в кристаллическом, наноструктурном и аморфном состояниях» (гос. регистрация, постановление Президиума РАН от 21 февраля 2006 года № 51 (2006 – 2010)); 3 – «Структурные и микромагнитные свойства кристаллических, аморфных и наноструктурированных сплавов, содержащих 3d- и 4s- элементы, как основа для разработки новых функциональных материалов» (шифр «Спин», № гос. регистрации 01200613391 (2010–2013)); 4 – «Новые многокомпонентные и наноструктурированные функциональные магнитные материалы» (шифр «Магнит», № гос. регистрации 01201463328 (2014 – 2016)). В рамках государственного контракта от 22 марта 2007 г. №2 02.513.11.3053 (Шифр «2007–31.3–07–01–156») «Разработка наноструктурных материалов со специальными практически важными механическими, магнитными и электрическими свойствами для новых конструкционных и функциональных применений».

14. Иванова А. Л. Выращивание кристаллов / А. Л. Иванова, С. О. Фоминых. – Текст : электронный // Актуальные вопросы методики преподавания математики и физики : сб. докладов и научных статей региональной научно–практической конференции. – Чебоксары : Чувашский государственный педагогический университет им. И.Я. Яковлева. — 2020. – С. 31–34 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Кристаллы занимают особое место в жизни человека. Они широко используются в науке и технике. Процесс выращивания кристаллов в домашних условиях позволяет глубже понять их физические свойства.

15. Изучение влияния свойств исходного алмазного сырья на свойства поликристаллических алмазных материалов / С. А. Перфилов, М. В. Воробьева, И. А. Евдокимов. – Текст : электронный // Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технология. — 2021. – Т. 64. – № 12. – С. 48–54 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Алмазные поликристаллы (ПКА) получены из различных алмазных микропорошков пропиткой эвтектикой кобальт – карбид вольфрама в условиях высоких давлений и температур. Спекание проводили в камере высокого давления (КВД) типа «тороид» с диаметром лунки 39 мм при следующих параметрах: давление 5,5–6 ГПа, температура ~ 1450 °С, на установке одноосного сжатия на базе пресса усилием 25000 кН. В качестве исходного алмазного сырья использованы алмазные микропорошки с размером зерна 20/14 мкм по ГОСТ 9206–80, полученные дроблением из различного алмазного сырья с последующим разделением по зернистостям. Первая партия порошков была получена из среднепрочных марок АС 15 – АС 50, вторая из низкопрочных марок АС 4 – АС 6, а третья из природных алмазных порошков. Приведены результаты металлографических исследований шлифов и сколов ПКА, позволяющие определить особенности их микроструктуры, проведены рентгенофазовые исследования. В пропитанном алмазном слое обнаружено образование карбида вольфрама W_2C , возможно образующегося при распаде исходного карбида вольфрама WC с преимущественным образованием из него алмаза в условиях эксперимента. Исследованы износостойкость, микротвердость, плотность полученных алмазных поликристаллов. Установлено, что свойства исходного алмазного сырья оказывают наибольшее влияние на износостойкость получаемых поликристаллических алмазных материалов. Данный факт необходимо учитывать при разработке поликристаллических алмазов инструментального назначения. Обнаруженная относительно невысокая износостойкость ПКА из порошков природных алмазов может быть объяснена как морфологией исходных частиц, так и меньшей их способностью к перекристаллизации в условиях высоких давлений и температур.

16. Ильинова. Т. Н. Кристаллизация, механические и коррозионные свойства аморфных металлических сплавов $Fe_{80,2}P_{17,1}Mo_{2,7}$ и $Fe_{76,5}P_{13,6}Si_{4,8}Mn_{2,4}V_{0,2}C_{2,5}$: автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата химических наук : специальность Химия твердого тела / Т. Н. Ильинова ; Воронеж. гос. ун–т. – Воронеж, 2019. – 16 с. – Текст : электронный // ЭБ РНБ.

Цель работы – установление структурных превращений в аморфных сплавах $Fe_{80,2}P_{17,1}Mo_{2,7}$ и $Fe_{76,5}P_{13,6}Si_{4,8}Mn_{2,4}V_{0,2}C_{2,5}$ в результате термической или фотонной обработки и их корреляции с механическими и коррозионными свойствами.

17. Исаенкова М. Г. Кристаллографическая текстура поликристаллических материалов : учеб. пособие к лаб. работе / М. Г. Исаенкова, О. А. Крымская, Ю. А. Перлович. — Москва : Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», 2019. — С. 40 — ISBN 978–5–7262–2374–2. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART.

Учебное пособие «Кристаллографическая текстура поликристаллических материалов» по дисциплинам «Структура и свойства наноматериалов и сложных соединений», «Современные представления о структуре материалов», «Физические основы дифракционных методов и структура материалов» знакомит студентов со способами описания преимущественной ориентации зерен в поликристаллических материалах с разными кристаллическими решетками, рентгеновскими дифрактометрическими методами измерения прямых и обратных полюсных фигур, способами их индентирования и представления, методами расчета ФРО. Описание содержит практические указания по выполнению лабораторной работы и контрольные вопросы для её сдачи. Предназначено для студентов НИЯУ МИФИ, обучающихся по направлениям «Технологии разделения изотопов и ядерное топливо», «Материаловедение и технологии материалов» и «Ядерная физика и технологии».

18. Квашнина А. Р. Исследование процесса кристаллизации и роста поликристаллов солей и сахара / А. Р. Квашнина. — Текст : электронный // Новое поколение выбирает науку : Материалы XII Регионального научно-исследовательского конкурса среди старшеклассников и обучающихся профессиональных образовательных организаций Волгоградской области. — Волгоград : Волгоградский государственный аграрный университет. — 2021. — С. 28–30 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Изучить процесс кристаллизации различных солей из водных растворов. Выявить закономерности роста и формирования кристаллов солей. Используя двумерную модель кристаллизации Чернова–Миркина рассмотреть кинетику кристаллизации.

19. Колесниченко А. В. К построению термодинамики квантовых неэкстенсивных систем в рамках статистики Тсаллиса / А. В. Колесниченко. — Текст : электронный // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. — 2019. — № 16. — С. 1–44 // НЭБ eLIBRARY.ru.

В рамках квантовой статистики Тсаллиса, основанной на параметрической неаддитивной энтропии, связанной с матрицей плотности, получены термодинамические равенства для большого канонического квантового ансамбля. Получено обобщение нулевого закона термодинамики для независимых квантовомеханических систем при их тепловом контакте, вводящее в рассмотрение так называемую физическую температуру, отличную от инверсии множителя Лагранжа β . С учетом обобщённого первого закона термодинамики и преобразования Лежандра проведен анализ модифицированных термодинамических соотношений в статистике

Тсаллиса. На основе свойства выпуклости различающей информации Ратье–Каннапана, обобщённой на квантовый случай, обсуждается второй закон термодинамики. Изучены спонтанные переходы между стационарными состояниями сложной квантовомеханической системы и доказана H–теорема Больцмана. Развитый подход предполагает использование неэкстенсивной квантовой термодинамики в различных контекстах, касающихся, в частности, моделирования квантовых тепловых эффектов в наноустройствах, в материаловедении, биомедицине и других квантовых технологиях.



20. Кондратьев Н. С. Многоуровневая модель поликристаллов: применение к оценке влияния текстуры и разориентации зерен на величину критической деформации инициации динамической рекристаллизации / Н. С. Кондратьев, П. В. Трусков, А. Н. Подседерцев. – Текст : электронный // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. — 2021. – № 4. – С. 83–97 // НЭБ eLIBRARY.ru

Современное состояние конститутивных моделей материалов и развитие вычислительной техники дают возможность численно реализовать комплексные многоуровневые модели, позволяющие описывать текущее

состояние и эволюцию структуры материала. Модели данного класса позволяют осуществить постановку и решение задач оптимального управления процессами обработки металлов давлением с целью формирования требуемых эксплуатационных характеристик готовых изделий и их заготовок. Для решения этой проблемы в рамках настоящей работы применена разработанная многоуровневая модель для описания термомеханической обработки поликристаллических материалов. Модель основана на подходе с введением внутренних переменных, в котором в явном виде рассматриваются носители и физические механизмы процессов горячей интенсивной пластической деформации. При температурах деформирования порядка и выше 0,5 гомологической особое влияние на формирование и изменение зеренной и дефектной структуры материала оказывает процесс рекристаллизации. В работе рассматривается задача определения критической деформации инициации динамической рекристаллизации в зависимости от взаимной разориентации соседних зерен и текстуры материала. Для этого с применением многоуровневой модели проводятся численные эксперименты по описанию двух этапов неупругого деформирования. На первом этапе рассматривается холодное неупругое деформирование простым сдвигом и сжатием, приводящее к формированию соответствующей текстуры. На втором этапе рассматривается одноосное горячее растяжение. Исходное распределение кристаллографической разориентации зерен полагается равномерным. Рассматриваются два варианта взаимной разориентации зерен с предписанными повышенными и пониженными значениями средних углов разориентации. Процесс рекристаллизации в явном виде не моделируется, в представленном виде модель предназначена для оценки критической степени деформации инициации рекристаллизации. Показано, что наибольшее влияние на критическую деформацию имеет взаимная разориентация зерен нежели текстура. Увеличение угла взаимной разориентации зерен способствует более раннему началу процесса динамической рекристаллизации. Формирование деформационной текстуры приводит к уменьшению угла взаимной разориентации зерен и, соответственно, к уменьшению интенсивности динамической рекристаллизации. Несмотря на это, с ростом деформации движущая сила динамической рекристаллизации – среднее значение разности запасенной энергии – увеличивается, что приводит к ее реализации.

21. Кондратьев Н. С. Многоуровневая физически-ориентированная модель : применение к описанию начальной стадии динамической рекристаллизации поликристаллов / Н. С. Кондратьев, П. В. Трусков, А. Н. Подседерцев. – Текст : электронный // Проблемы прочности и пластичности. — 2021. – Т. 83. – № 4. – С. 451–461 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Создание математических моделей, позволяющих описывать изменения структуры материала и напряженно-деформированного состояния при термомеханических воздействиях, является актуальной

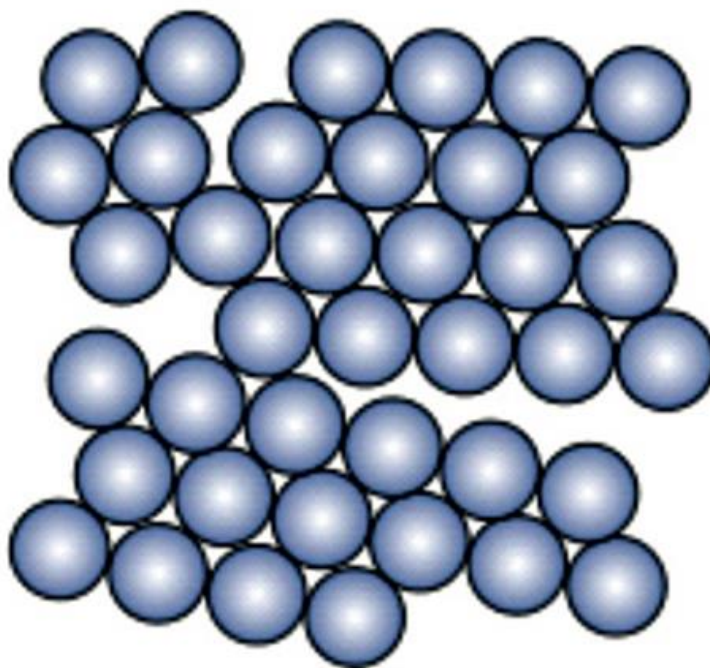
задачей. С этой целью разработана многоуровневая физически-ориентированная модель для исследования неупругого деформирования поликристаллов. Формулируется задача моделирования двух этапов деформирования образца из поликристаллической меди. На первом этапе исследуется предварительная холодная интенсивная пластическая деформация при сложном нагружении. Рассматриваются два варианта предварительной подготовки образцов – однородное деформирование, соответствующее равноканальному угловому прессованию, и нагружение по замкнутой траектории деформации. На втором этапе рассматривается одноосное высокотемпературное деформирование до начала интенсивного процесса динамической рекристаллизации. Приводится описание способа оценки величины объемной доли рекристаллизованного материала в рамках многоуровневой модели. Исследуется влияние на рекристаллизацию температуры деформирования, предварительной деформации, деформационной текстуры, среднего угла взаимной разориентации соседних зерен. Указанные параметры определяют развитие динамической рекристаллизации, поскольку ее основной физической причиной является разность запасенной энергии между соседними зернами. Показано, что разработанная математическая модель пригодна для описания термической активации динамической рекристаллизации при значении температур в диапазоне 0,4–0,7 гомологической температуры. Сложность траектории нагружения определяет вид деформационной текстуры, ее «остроту» или «рассеянность», углы взаимной разориентации соседних зерен. Представлены результаты проведенных вычислительных экспериментов. Согласно предложенному способу определена величина деформации на высокотемпературном этапе, при которой начинается интенсивный рост новых рекристаллизованных зерен.

22. Лавров И. В. Метод прогнозирования эффективной проводимости текстурированных поликристаллов с учетом межкристаллитных промежутков / И. В. Лавров. – Текст : электронный // Известия высших учебных заведений. Электроника. — 2020. – Т. 25. – № 4. – С. 299–309 // НЭБ eLIBRARY.ru.

В реальных поликристаллах кристаллиты отделены друг от друга межзеренным пространством, оказывающим влияние на эффективную проводимость поликристалла. Это влияние тем больше, чем меньше размеры кристаллов. В работе разработан метод прогнозирования эффективной проводимости поликристаллических сред, который учитывает наличие межзеренного пространства. Для построения метода принята модель поликристалла, в которой кристаллиты считаются неоднородными, состоящими из однородного кристаллического анизотропного ядра и однородной изотропной оболочки. В данной модели роль межкристаллитных промежутков играют оболочки кристаллитов. Для вычисления эффективной проводимости поликристалла использовано обобщенное приближение эффективного поля, в качестве параметра среды сравнения принята эффективная проводимость среды, т.е. использован

метод самосогласованного решения. На основе разработанного метода для случая сферических кристаллитов со сферической оболочкой получена формула для эффективной проводимости поликристалла в зависимости от тензора проводимости кристаллического ядра, проводимости оболочки и объемной доли ядра в кристаллитах. Данная формула применяется для частных случаев поликристаллической среды, а именно для поликристалла с однотипными кристаллитами с изотропным ядром, в этом случае выражение для эффективной проводимости совпадает с классической формулой Максвелла – Гарнетта; поликристалла с однотипными кристаллитами с анизотропными ядрами при одинаковой ориентации их кристаллографических осей; поликристалла с однотипными кристаллитами с анизотропными ядрами при равномерном распределении ориентаций их кристаллографических осей в пространстве; поликристалла с проводящими ядрами кристаллитов и абсолютно непроводящими оболочками. В последнем случае эффективная проводимость поликристалла обращается в нуль, что полностью согласуется с физическим смыслом.

Polycrystalline



23. Лиопо В. А. Вюртцит как кристалл со структурой лонсдейлитового типа / В. А. Лиопо, И. А. Лявшук, Е. В. Овчинников. – Текст : электронный // Вестник Гродненского государственного университета имени Янки Купалы. Серия 2. Математика. Физика. Информатика, вычислительная техника и управление. — 2022. – Т. 12. – № 1. – С. 87–96 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Целью исследования являлось доказательство необходимости выделения вюртцита и других изоструктурных с ним кристаллов в самостоятельный тип лонсдейлитоподобных структур по аналогии с алмазоподобными. Объект исследования – структуры кристаллов лонсдейлита и кристаллов, изоструктурных вюртциту. Во введении указана проблема исследования – необходимость проведения дополнительного анализа структуры кристаллохимических свойств вюртцита, не позволяющих построить ячейку Браве P -типа, что обусловлено ГПУ-системой. В основной части работы показано, что ячейка решетки кристалла лонсдейлита и вюртцита, построенная на наименьших некомпланарных межатомных векторах, не определяет трехмерную трансляцию в решетке этих кристаллов. Проанализировано несоответствие общепринятой ячейки лонсдейлита и вюртцита ни одной из известных ячеек Браве (P , I , F , C). Рассмотрена связь длины ребра структурного тетраэдра с межатомным вектором, связывающим атом в вершине тетраэдра и в его центре. Обосновано невыполнение принципов плотнейшей шаровой упаковки в кристаллах лонсдейлита и вюртцита. Показано, что в лонсдейлитоподобных структурах ячейки решетки определяются ребром структурного тетраэдра. Проанализирована амплитудная составляющая структурной амплитуды и структурного фактора кристаллов лонсдейлита и вюртцита. Рассмотрена фазовая составляющая структурного фактора кристаллов лонсдейлита и вюртцита. Разработана методика расчета «веса» узлов обратной решетки кристаллов с лонсдейлитовым типом структур. Обоснована необходимость учета кристаллографического кластера при указании межплоскостного расстояния, определенного по рентгенограмме поликристалла с гексагональной решеткой. В заключении сделан вывод: кристаллы с лонсдейлитоподобной структурой противоречат принципам канонической кристаллографии, так как их элементарная ячейка не соответствует ни одной из ячеек Браве и не выполняет требований для P -ячейки. Полученные результаты могут быть использованы специалистами в области структурной кристаллографии, а также представлять интерес для исследователей, изучающих проблемы нанофизики и нанотехнологий.

23. Лиопо В. А. Обратная решетка нанокристаллов / В. А. Лиопо, И. А. Лявшук, Е. В. Овчинников. – Текст : электронный // Вестник Гродненского государственного университета имени Янки Купалы. Серия 2. Математика. Физика. Информатика, вычислительная техника и управление. — 2021. – Т. 11. – № 1. – С. 107–117 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Целью работы являлось теоретическое обоснование наличия размерных границ между макро-, нано- и атомно-кластерными состояниями. Объект исследования – обратная решетка кристаллов с различными размерами. Во введении указана проблема исследования – предположение, что для зависимостей параметра физического свойства от размера частицы ($P(r)$) граница между макро- и наносостояниями L_0 влечет утверждение: при $r > L_0$ кристалл – макроскопический объект с неизменной обратной решеткой, а при $r < L_0$ в обратной решетке начинаются изменения,

которые приводят к изменению структурно–энергетических свойств исследуемого объекта. Утверждается, что величина L_0 является характеристикой вещества кристаллита и связана с температурой Дебая – θ_D . В основной части работы с применением формулы Шеррера определена связь между размерами узла обратной решетки и размерами кристаллита. Проанализирована связь между изменениями распределения импульса при уменьшении размера кристаллита. Узлы обратной решетки расширяются, т.е. объем пространства в обратной решетке, где точки с нулевым весом, уменьшается. Показано, что наряду с границей между макро– и наносостояниями существует граница между нано– и атомно–кластерными состояниями. Установлено, что изменение параметров физических свойств нанокристаллов обусловлено изменениями распределения импульсов, являющимися собственными функциями операторов Гамильтона и трансляции, т.е. при анализе процессов в нанокристаллах необходимо использовать методы квантовой механики. Продемонстрировано, что размер рефлекса не является критерием размера узла обратной решетки, необходимо учитывать угол дифракции. В заключении сделан вывод, ставший дополнительным подтверждением того, что размеры узлов обратной решетки при постоянной температуре кристалла зависят только от размера образца. Представлено обоснование того, почему L_0 является индивидуальным свойством вещества наночастицы, а установление жесткой границы между нано– и макрофазами (100 нм) абсолютно условное и не имеет физического смысла. Полученные результаты могут быть использованы специалистами в области кристаллофизики и материаловедения.

24. Липский В. А. Получение изотопно–обогащенного поликристаллического германия пиролизом моногермана / В. А. Липский, В. А. Гавва, А. Д. Буланов. – Текст : электронный // Неорганические материалы. — 2020. – Т. 56. – № 3. – С. 235–240 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Гидридный метод применен для получения высокочистого изотопно–обогащенного германия. Установлены основные причины, снижающие выход германия в процессе пиролиза моногермана. С целью повышения выхода оптимизированы условия пиролиза в лабораторной установке проточного типа. При скорости подачи моногермана в реактор 30 мл/мин оптимальная температура проведения разложения моногермана составляет 420–450°C. Такие условия обеспечивают производительность процесса ~6 г/ч, высокий выход продукта и позволяют получать большую часть германия в виде поликристалла. Путем пиролиза изотопно–обогащенного моногермана получены образцы высокочистого изотопно–обогащенного германия в виде поликристаллических слитков с выходом более 95%. Образцы имели электронный тип проводимости и удельное электросопротивление 25–50 Ом см. Содержание контролируемых примесей в полученных слитках германия, обогащенного изотопами ^{72}Ge , ^{73}Ge , ^{74}Ge , ^{76}Ge , не превышало 10^{-4} – 10^{-6} мас. %.



25. Лисичкин Г. В. Химия поверхности неорганических наночастиц /Г. В. Лисичкин, А. Ю. Оленин, И. И. Клакова. – Техносфера. — 2020. – 380 с. — Текст : электронный // ЭБС Лань.

В книге систематически изложены основные аспекты химии поверхности неорганических наночастиц – металлов, оксидов, галогенидов, полупроводников, nanoалмаза, графена, углеродных нанотрубок. Описаны особенности строения поверхности наночастиц, их реакционная способность, синтез привитых поверхностных соединений. Рассмотрены как уже известные, так и перспективные области практического использования поверхностно–модифицированных наночастиц, ассоциатов и конъюгатов наночастиц с биологически активными и лекарственными веществами: селективная адсорбция, химический и биохимический анализ, фармакология, биовизуализация, магнитно–резонансная томография, катализ, флотация и др. Обширные библиографические списки охватывают оригинальные и обзорные работы, выполненные в последние 10–15 лет.

Книга предназначена научным работникам и инженерам, занимающимся применением наночастиц при решении материаловедческих, биомедицинских, физико–химических, технологических и других подобных задач. Она может быть полезна студентам и аспирантам, обучающимся по специальностям, связанным с нанотехнологиями.

26. Любимов Д. Н. Квантовые принципы сотворения реальности : монография / Д. Н. Любимов, С. В. Кирильчик. — Ростов–на–Дону, Таганрог : Издательство Южного федерального университета. — 2021. — 142 с. — ISBN 978–5–9275–3627–6. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART.

Книга посвящена одной из интереснейших и в то же время достаточно слабо освещенных в современной научной и научно–популярной литературе тем – происхождению физических законов и их фундаментальной подоплеке, в основе которой лежат квантово–механические явления и процессы. К последним относятся декогеренция, редукция, запутанность и прочие процессы, составляющие сердцевину современной квантовой физики и, к сожалению, в недостаточной мере изложенные в традиционных вузовских курсах. Адресована любознательным читателям, интересующимся проблемами современной науки.

27. Магнитные и резонансные свойства поликристалла $Y_{0.5}Sr_{0.5}Cr_{0.5}Mn_{0.5}O_3$ / Г. С. Патрин, М. М. Матаев, К. Ж. Сейтбекова. – Текст : электронный // Физика твердого тела. — 2020. – Т. 62. – № 8. – С. 1204–1208 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Представлены результаты экспериментальных исследований магнитостатических и магниторезонансных свойств поликристаллической системы $Y_{0.5}Sr_{0.5}Cr_{0.5}Mn_{0.5}O_3$. Получено, что преобладающим является внутрикристаллическое ферромагнитное взаимодействие, при этом межкуристаллическое взаимодействие носит антиферромагнитный характер. Спектр магнитного резонанса в магнитоупорядоченной области состоит из двух линий. Высокополевая линия относится к взаимодействующим частям оболочек поликристаллитов, а низкополевой пик связан с неупорядоченной системой ферромагнитных частиц. Ключевые слова: иттрий–стронциевый хромито–манганит, антиферромагнитное взаимодействие, обратная восприимчивость, магнитный резонанс.

28. Малый В. И. Понятия и законы квантовой механики : теоретические основания для квантовых постулатов / В. И. Малый. – Москва : URSS : ЛЕНАНД. — 2021. – С. 197–198. – Текст : электронный // ЭБ РНБ.

Представлен независимый подход к построению квантовой механики, отличающийся простотой исходных положений. Отпадает необходимость принимать на веру большой ряд сложных для первоначального восприятия постулатов. Полное построение аппарата теории вообще не нуждается в каких–либо предположениях. Определяется понятие простого потока микрочастиц, которое является естественным упрощением резерфордского представления о структуре потоков частиц, реализованных в его опытах. Локальная структура простого потока описывается наблюдаемыми величинами: \mathbf{z} –вектором плотности тока и модулем скорости потока.

29. Морхова Е. А. Моделирование ионной проводимости в неорганических соединениях с мультивалентными катионами / Е. А. Морхова, А. А. Кабанов, В. А. Блатов. – Текст : электронный // Электрохимия. — 2019. – Т. 55. – № 8. – С. 967–983 // НЭБ eLIBRARY.ru.

В работе проведен поиск перспективных ионопроводящих кристаллических веществ с использованием высокопроизводительного компьютерного скрининга базы данных по неорганическим структурам ICSD и квантовомеханического моделирования ионного транспорта. В результате отобраны 246 магний-, кальций- или стронций-кислородсодержащих соединений, обладающих 1D, 2D, 3D-картами миграции двухвалентных катионов и не исследованных ранее на наличие ионной проводимости. Для десяти структур с наиболее простыми системами каналов миграции, в том числе для известных катионных проводников $Mg_{0.5}Ti_2(PO_4)_3$, $CaAl_2O_4$, $Sr_{0.5}Al_{11}O_{17}$, были проведены квантовомеханические расчеты и получены энергии миграции катионов. Среди изученных соединений структуры $Mg_3Nb_6O_{11}$ и $Mg_3V_2(SiO_4)_3$ имеют наиболее низкие энергии миграции ионов магния и узкие запрещенные зоны, и могут рассматриваться как перспективные катионные проводники для использования в магниевых аккумуляторах.

30. Муслев С. А. Характеристики упругой анизотропии кристаллов Ti–Ni с памятью формы и их связь с экстремальными значениями коэффициента Пуассона / С. А. Муслев. – Текст : электронный // Письма о материалах. — 2021. – Т. 11. – № 1(41). – С. 28–32 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Исследование физико-механических свойств способно пролить свет на картину мартенситных переходов в материалах, ответственных за уникальные эффекты памяти формы и сверхэластичности. В основе мартенситных превращений в металлах и сплавах лежат деформационные процессы сдвигового типа, поэтому изучение их упругого поведения содержит важную информацию о природе и механизмах этих фазовых переходов. В данном сообщении анализируется величина и связь степени упругой анизотропии и коэффициента Пуассона кристаллов сплавов Ti–Ni на основе собственных и литературных данных, полученных опытным и расчетным путем из первых принципов. Установлена значительная вариабельность коэффициента упругой анизотропии A кристаллов Ti–Ni, обусловленная, очевидно, интенсивным упругим “размягчением” решетки сплавов накануне мартенситных превращений (особенно постоянной c_{44}). Минимальный коэффициент Пуассона кристаллов Ti–Ni равен -0.25 . Максимальное значение μ составило 1.10 , что больше теоретического предела для поликристаллов. Экстремальные значения μ достигались для направлений, когда растяжение было ориентировано вдоль направления $\langle 110 \rangle$, то есть диагоналей грани куба. Интегрированием по поперечным направлениям и направлениям приложения силы установлено, что среднее значение $\langle \mu \rangle 0.41$. Сплавы на основе Ti–Ni могут быть рассмотрены, таким образом, как частичные ауксетики – материалы с отрицательным

коэффициентом Пуассона в части направлений, то есть иметь $\mu < 0$ при выборе одних направлений и быть обыкновенными материалами с положительным μ для других направлений. Упругая анизотропия кристаллов Ti–Ni может быть определена на основе численных различий экстремальных значений μ как $A_\mu = |\mu_{\max} - \mu_{\min}| / \langle \mu \rangle$. Установлена сильная корреляционная связь между коэффициентом упругой анизотропии A и фактором A_μ (коэффициент корреляции 0.9871). Эмпирически установлены параметры линейной зависимости приведенного фактора анизотропии $A_\mu^* = 1.33779A_\mu + 0.18542$, для которого $A_\mu^* = A$.

31. Никифоров А. С. Математическое моделирование неупругого деформирования гранецентрированных кубических поликристаллов с учетом зарождения микротрещин / А. С. Никифоров, П. С. Волегов. – Текст : электронный // Математическое моделирование в естественных науках. — 2019. – Т. 1. – С. 117–121 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Работа посвящена математическому моделированию процесса неупругого деформирования поликристалла с гранецентрированной кубической решеткой с учетом зарождения микротрещин. Решена задача о среднем расстоянии между дислокациями в дислокационном скоплении в зависимости от количества дислокаций в скоплении при заданном касательном напряжении.

32. Никонов А. Ю. Молекулярно–динамическое исследование особенностей перестройки приповерхностной структуры поликристалла железа при локальном динамическом нагружении / А. Ю. Никонов, А. М. Никонова. – Текст : электронный // Физическая мезомеханика. Сб. материалов с многоуровневой иерархически организованной структурой и интеллектуальные производственные технологии : тезисы докладов Международной конференции, посвященной 90–летию со дня рождения основателя и первого директора ИФПМ СО РАН академика Виктора Евгеньевича Панина в рамках Международного междисциплинарного симпозиума "Иерархические материалы: разработка и приложения для новых технологий и надежных конструкций". – Томск : Национальный исследовательский Томский государственный университет. — 2020. – С. 188 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Целью работы является изучение с применением метода молекулярной динамики особенностей зарождения и развития структурных дефектов в поликристаллическом материале в условиях локализованного поверхностного пластического деформирования.



33. Новосадов Б. К. Новое представление связи вращений и внутренних движений частиц в атомно–молекулярных системах / Б. К. Новосадов. – Текст : электронный // Бутлеровские сообщения. — 2021. – Т. 65. – № 3. – С. 16–24 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Дано новое уточнение теоретического представления о связи вращений и внутренних движений частиц на основе применения квантово–механического закона сохранения углового момента системы. Представлен вывод точного соотношения кинетической энергии системы частиц и их полного углового момента, выполненный автором впервые в литературе. Отличие полученного соотношения для системы частиц от формулы для одной частицы, давно известной в теоретической механике, состоит в появлении дополнительных вкладов во внутреннюю энергию системы частиц от парциальных угловых моментов частиц системы, что приводит к дополнительному вырождению вращательных состояний вследствие встречных маятниковых движений частиц, не влияющих на сохранение величины полного углового момента системы. В результате показана принципиальная множественность вращательных состояний системы многих частиц при заданном угловом моменте. Эта особенность закона сохранения полного момента системы обуславливает дополнительные спектро–структурные свойства атомов и молекул, прежде не учитываемые в теории их квантовых состояний. Указана принципиальная важность закона

сохранения углового момента в теоретическом анализе строения молекул для астрофизических и физико–химических приложений.

34. Норман Г. Э. Полуметаллические состояния кристаллического молекулярного водорода при высоких давлениях / Г. Э. Норман, И. М. Сайтов. – Текст : электронный // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 2020. – Т. 111. – № 3–4(2). – С. 175–180 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Получены полуметаллические состояния кристаллического молекулярного водорода при температуре 100 К в диапазоне давлений от 410 до 626 ГПа. Для анализа характера проводимости проводится расчет зонной структуры в рамках теории функционала плотности с использованием гибридного обменно–корреляционного функционала HSE (Heyd–Scuseria–Ernzerhof). Одно из полуметаллических состояний возникает в моноклинной структуре с симметрией $C2/c$ при сжатии до давления 410 ГПа, при котором происходит закрытие щели между валентной зоной и зоной проводимости. Причем валентная зона является частично незаполненной, а зона проводимости – частично заполненной, что является характерным признаком полуметалла. При давлении 302 ГПа кристаллический молекулярный водород со структурой $C2/c$ остается изолятором. Найдена зависимость электропроводности от давления для 300–500 ГПа. Второе полуметаллическое состояние наблюдается для ромбической структуры с симметрией $Cmca-4$ при давлении 626 ГПа.

35. О эффективных упругих свойствах слоистого композиционного материала, изготовленного по 3-D технологии / И. К. Архипов, В. И. Абрамова, О. В. Кузовлева [и др.]. – Текст : электронный // Чебышевский сб. — 2021. – Т. 22. – № 3(79). – С. 438–442 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Рассматривается слоистый композит, изготовленный по 3D–технологии из порошков меди и нержавеющей стали. Каждый слой обладает пористостью, обусловленной технологическим процессом спекания порошковых материалов. Вычисляются эффективные упругие характеристики такого композита, учитывающие слоистость и пористость в компонентах.

36. Остапович К. В. Исследование кристаллографических текстур при многоуровневом моделировании деформирования поликристаллов с помощью методов кластерного анализа / К. В. Остапович, П. В. Трусов. – Текст : электронный // Вычислительная механика сплошных сред. — 2019. – Т. 12. – № 1. – С. 67–79 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Рассмотрена возможность применения аппарата кластерного анализа для описания и исследования кристаллографических текстур по результатам расчетов ориентаций решеток кристаллитов (зерен, субзерен), полученным с использованием многоуровневых упруговязкопластических моделей поликристаллических материалов. Поставлена задача кластеризации текстуры, состоящая в разбиении заданной выборки ориентаций

кристаллической решетки на непересекающиеся подмножества с элементами, в некотором смысле близкими между собой. Для формализации указанного понятия близости в пространстве ориентаций введено специальное псевдометрическое расстояние, учитывающее поворотную симметрию решетки. Данное расстояние индуцируется естественной римановой метрикой и определяет наименьший угол поворота, связывающего симметрически эквивалентные ориентации аргументов. Сформулирован эвристический алгоритм решения поставленной задачи, основанный на итерировании некоторых распространенных методов кластеризации. Для поликристаллического агрегата предложенный подход позволяет установить области пространства ориентаций с повышенной плотностью элементов, а также вычислить для таких областей некоторые эффективные характеристики. Разработанная процедура включает в себя следующие стадии: разделение выборки ориентаций на слои; кластеризацию по достижимости (в смысле транзитивного замыкания принятого критерия близости ориентаций); так называемую медоидную кластеризацию; расщепление слабо локализованных кластеров. Приложение созданной методики кластеризации продемонстрировано на примерах текстур простого сдвига и одноосного сжатия, полученных при моделировании неупругого деформирования представительного объема поликристаллической меди. Найдены локальные однопараметрические аппроксимации заданного вида для плотностей распределения углов между ориентациями и медоидами (условными центрами) соответствующих им кластеров, а также оценены их статистические значимости на равновероятностных интервалах.

37. Привалов А. С. Возможность влияния на анизотропию при создании объектов методами аддитивного формирования изменением пространственного расположения виртуального оригинала / А. С. Привалов. – Текст : электронный // Проблемы и перспективы развития России: молодежный взгляд в будущее : сб. научных статей 4-й Всероссийской научной конференции. – Курск : Юго-Западный государственный университет. — 2021. – С. 281–286 // НЭБ eLIBRARY.ru.

В статье рассмотрены вопросы причин возникновения анизотропных свойств в изделиях, полученных аддитивными и традиционными способами формообразования. Представлен вариант возможного изменения анизотропии в отдельных плоскостях объектов, созданных 3D-печатью.



38. Примесный состав и параметры кристаллической решетки высокочистого α -Mn / Б. Н. Кодесс, О. П. Лазукина, Е. Н. Волкова [и др.]. – Текст : электронный // Неорганические материалы. — 2020. – Т. 56. – № 5. – С. 538–543 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Проведено исследование образца высокочистого марганца, предоставленного Выставкой–коллекцией веществ особой чистоты, работающей на базе Института химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девятовых РАН, и охарактеризованного на содержание и следы 59 примесей–элементов. Содержание основы составило 99.9993 мас. %. Ростовая поверхность представляет собой сросшиеся и отдельные монокристаллы, из которых были вырезаны образцы для измерений параметров кристаллической решетки. Высокоточные измерения выполнены при комнатной температуре (298 ± 1 К) в полной сфере Эвальда на 4–кружном рентгеновском дифрактометре XCalibur (Rigaku–Oxford Diffraction). Параметры кристаллической решетки определены по массиву высокоугловых рефлексов для отобранных образцов монокристаллов. Размеры элементарной ячейки оказались выше, чем значения для поли– и монокристаллических образцов марганца, ранее установленные различными авторами.

39. Расчет упругих свойств поликристаллических материалов на основе характеристик кубических и гексагональных кристаллов / С. А. Муслов, А. А. Корнеев, А. А. Сеницын. – Текст : электронный // Colloquium–journal. — 2020. – № 10–2(62). – С. 24–27 // НЭБ eLIBRARY.ru.

На основании упругих постоянных и коэффициентов податливости монокристаллов вычислены упругие характеристики соответствующих поликристаллов с помощью известных соотношений Фойгта, Ройсса и Хилла. В качестве моно- и поликристаллов рассмотрены интерметаллиды TiNi с кубической решеткой и твердые ткани зуба – биоконпозиты эмаль и дентин, с минеральной компонентой, которую можно отнести к гексагональной сингонии. Численные значения упругих постоянных и коэффициентов податливости кристаллов применялись на основании собственных и литературных данных. Во всех случаях результаты расчета сравнивались с опытными данными, полученными на поликристаллах.

40. Ридный Я. М. Взаимодействие примесей углерода в железе: ab initio моделирование : автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико–математических наук : специальность Физика конденсированного состояния / Я. М. Ридный ; ФГАОУ ВО Южно–Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет). – Челябинск, 2019. – 24 с. – Текст : электронный // ЭБ РНБ.

Основной целью данной работы является изучение методами компьютерного моделирования взаимодействия атомов углерода в феррите, мартенсите и аустените, а также влияние на него примесей на примере кремния.

41. Романов К. А. Оценка чувствительности отклика мезоуровня в двухуровневых моделях поликристалла к возмущениям ориентировок кристаллитов / К. А. Романов, А. И. Швейкин. – Текст : электронный // XLV Гагаринские чтения : сб. трудов Международной молодежной научной конференции. Секция "Механика и моделирование материалов и технологий". – Москва : Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского Российской академии наук. — 2019. – С. 141–143 // НЭБ eLIBRARY.ru.

С использованием двухуровневой модели неупругого деформирования поликристаллических металлов проведен анализ влияния ориентировок кристаллитов на реализацию механизмов деформирования. Проведена оценка чувствительности отклика мезоуровня к вносимым возмущениям в ориентировки кристаллитов, выявлены существенно чувствительные к возмущениям ориентировки кристаллитов.

42. Салиева Е. Э. Квантовая химия – наука будущего / Е. Э. Салиева, Р. Р. Газетдинов. – Текст : электронный // Академическая публицистика. – 2020. – № 6. – С. 40–43 // НЭБ eLIBRARY.ru.

В статье описана значение квантовой механики и квантовой химии для современной естественной науки. Квантовые расчеты на компьютере дополняют экспериментальные методы и становятся незаменимым инструментом в химическом испытании, и каждый современный химик должен знать основы этой науки.

43. Соколов А. С. Построение модели изотропного поликристалла на основе анизотропных характеристик ГПУ решетки / А. С. Соколов. – Текст : электронный // Гагаринские чтения – 2019 : сб. тезисов докладов XLV Международной молодежной научной конференции / Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет). – Москва, Барнаул, Ахтубинск, 2019. – С. 979–980 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Работа посвящена разработке упруговязкопластической модели поликристалла. Рассматривается анизотропный материал и эквивалентные ему изотропные, методы перехода от анизотропного к изотропному. Проведен ряд численных экспериментов для различных тензоров. Представлены выводы по результатам.

44. Соколов А. С. Построение модели изотропного поликристалла на основе анизотропных характеристик ГПУ решетки / А. С. Соколов. – Текст : электронный // Гагаринские чтения. – 2019 : сб. тезисов докладов XLV Международной молодежной научной конференции / Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет). – Москва, Барнаул, Ахтубинск : Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет). — 2019. – С. 979–980 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Работа посвящена разработке упруговязкопластической модели поликристалла. Рассматривается анизотропный материал и эквивалентные ему изотропные, методы перехода от анизотропного к изотропному. Проведен ряд численных экспериментов для различных тензоров. Представлены выводы по результатам.

45. Степаненко А. В. Исследование анизотропии свойств поликристалла на основе текстурных данных / А. В. Степаненко. – Текст : электронный // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. — 2019. – Т. 85. – № 9. – С. 46–51 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Представлены результаты исследования взаимосвязи кристаллографической текстуры поликристаллических материалов и анизотропии их физико–механических свойств. Приведен обзор методов расчета анизотропных свойств поликристаллов на основе данных, полученных рентгеновскими методами прямых и обратных полюсных фигур. Расчетные методы, основанные на применении функции распределения ориентировок кристаллитов, требуют использования больших объемов экспериментальных данных, поэтому они не пригодны для экспресс–оценки уровня анизотропии физических свойств образцов при их термомеханической обработке. Предложена методика для определения анизотропных свойств, использующая «ориентационные факторы». С помощью экспериментальных данных рентгенографического анализа (метод обратных полюсных фигур) получены выражения для расчета абсолютного и относительного отклонений физического параметра текстурированного поликристалла от его значения в изотропном состоянии. Оценены вклады отдельных кристаллографических ориентировок в формирование

анизотропии свойств образца. Исследована динамика количественных изменений анизотропных свойств поликристалла в процессе текстуробразования. Для анализа источника наиболее быстрых изменений анизотропии свойств использовали коэффициенты матрицы «отклика», расчет которых не зависит от результатов конкретных дифрактометрических измерений, а является общим для всех металлов с гексагональной плотноупакованной (ГПУ) – решеткой. Расчет анизотропии коэффициента теплопроводности, удельной электропроводности и температуропроводности выполняли для образцов деформированного иттрия, прошедших холодную прокатку со степенью обжатия $\varepsilon = 25\%$. Установили, что конечные физические свойства поликристалла с ГПУ–структурой в значительной степени определяются пирамидальными кристаллографическими ориентировками $\{1015\}$, $\{1124\}$.



46. Степаненко А. В. Метод экспресс-расчета анизотропных физических свойств поликристаллов / А. В. Степаненко. – Текст : электронный // Евразийское Научное Объединение. — 2019. – № 1–2(47). – С. 102–104 // НЭБ eLIBRARY.ru.

В статье рассматриваются методики расчета анизотропных физических свойств поликристаллических образцов, имеющих гексагональную плотноупакованную структуру кристаллической решетки. Сделан вывод, что методы, основанные на использовании функции распределения ориентировок $T(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)$ и ориентационных факторов Δi требуют обработки больших массивов экспериментальных данных, поэтому не могут быть рекомендованы для выполнения экспресс-оценок величин анизотропных свойств металлов. Предлагается упрощенная методика

расчета физических свойств, в основе которой учет долей и «веса» кристаллографических ориентировок кристаллитов в текстуре образца.

47. Степаненко А. В. Особенности расчета анизотропии физических свойств поликристаллов с острой однокомпонентной текстурой / А. В. Степаненко. – Текст : электронный // Символ науки: международный научный журнал. — 2019. – № 1. – С. 20–23 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Рассмотрены вопросы расчета анизотропии физических свойств поликристаллических материалов, в которых сформирована острая однокомпонентная текстура. Сделан вывод, что существующие методики не позволяют выполнять быстрые оценки изменения анизотропных свойств металлов в ходе технологического процесса. Предлагается методика, в которой используется рентгенографические данные, полученные по методу обратных полюсных фигур. Используя полюсные плотности для базисной ориентировки (0001) и пирамидальной ориентировки $\{10\bar{1}5\}$, выполнен расчет изменения удельного сопротивления тербия при пластической деформации холодной прокаткой.

Субструктурные превращения и фазовые переходы дислокационной структуры в сплавах Cu-Mn / Л. И. Тришкина, Т. В. Черкасова, А. Н. Соловьев [и др.]. – Текст : электронный // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Машиностроение, материаловедение. — 2021. – Т. 23. – № 3. – С. 59–65 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Физика пластичности и прочности во многом основана на дислокационной физике. Изучение дефектной субструктуры после пластической деформации проводилось с применением электронного микроскопа. Для исследования использовались поликристаллы ГЦК–сплавов на основе меди. Содержание Mn изменялось от 0,4 до 25 ат. %. Средний размер зерен в образцах равен 100 мкм. Образцы сплавов для исследования подвергались растяжению при комнатной температуре. Установлена последовательность изменения типов дислокационных субструктур в сплавах. В сплаве Cu + 0,4 ат. % Mn наблюдается следующая последовательность дислокационных субструктур (ДСС): клубки из дислокаций, ячеистая без разориентировки, ячеистая с разориентировками, в которых разориентировки между ячейками составляют больше $0,5^\circ$, микрополосовая. В сплавах с содержанием Mn более 6 ат. % наблюдается другая последовательность превращения ДСС: дислокационный хаос, дислокационные скопления, неразориентированная сетчатая, неразориентированная ячеисто–сетчатая, разориентированная ячеисто–сетчатая, микрополосовая. Тип ДСС, формирующийся при определенной степени деформации, характеризуется своими количественными параметрами и распределением дислокаций. Проведено количественное измерение параметров каждого типа субструктур. Присутствие одновременно при данной степени деформации не менее двух типов ДСС говорит о наличии двухфазности в материале. Рост степени деформации

способствует увеличению плотности дислокаций в материале. При этом объем субструктуры, которая сформировалась при небольших степенях деформации, уменьшается, а вновь образовавшаяся субструктура занимает в материале больший объем, чем предыдущая ДСС. Вновь сформированная ДСС продолжает развиваться с ростом деформации. При этом величина плотности дислокаций принимает критические значения. Накопление дислокаций в каждой сформированной субструктуре $\rho_{\text{сост}}$ гораздо выше, чем в предыдущих. Выявлена взаимосвязь параметров ДСС со средней скалярной плотностью дислокаций. Установлено, что большинство параметров ДСС могут являться параметрами фазовых превращений. Наблюдаемые зависимости характерны для превращений «порядок–беспорядок». При этом фаза представляет собой определенную организацию дислокаций в дислокационном ансамбле.

48. Тимофеева Н. А. Диффузионное легирование поликристаллического CVD–ZnSe ионами Fe²⁺ : диссертация . кандидата химических наук : 02.00.04 / Н. А. Тимофеева. – Нижний Новгород, 2020. – 125 с // УИС РОССИЯ (РГБ).

Целью работы является исследование влияния температуры и атмосферы (Ag, Zn, Se) диффузионного отжига на профиль распределения концентрации ионов Be²⁺ в СУБ^{^e}, определение основных параметров диффузии; Изучение влияния легирующей примеси железа на рекристаллизацию СУБ^{^e} в процессе высокотемпературной обработки; Установление закономерности распределения оптически активных центров в объеме и по границам зерен Be²⁺^{^e} вдоль направления диффузионного потока. Полученные данные использованы для выявления механизмов диффузии ионов Fe²⁺ и рекристаллизации CVD–ZnSe. Разработана методика изготовления лазерных элементов на основе легированного ионами железа селенида цинка и исследованы генерационные характеристики Fe²⁺:ZnSe лазеров.

49. Ткачев В. В. Эволюция структурных неоднородностей аморфных и аморфно–нанокристаллических сплавов системы Fe–(Cu, Nb)–(Si, В) в процессах структурной релаксации : автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико–математических наук : специальность Физика конденсированного состояния / В. В. Ткачев ; ФГАОУ ВО Дальневосточный федеральный университет. – Владивосток, 2019. – 22 с. – Текст : электронный // ЭБ РНБ.

Целью работы является изучение характера структуры и свойств сплавов типа Файнмет, в зависимости от их элементного состава, в исходном состоянии и процессах структурной релаксации.

50. Филоненко В. П. Поликристаллические алмазы типа карбонадо, синтез и новые перспективы применения / В. П. Филоненко. – Текст : электронный // Материаловедение, формообразующие технологии и оборудование 2021 (ICMSSTE 2021) : материалы международной научно–практической конференции. – Симферополь : Общество с ограниченной ответственностью "Антиква". — 2021. – С. 41–48 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Представлены результаты синтеза, анализа структуры и температурной зависимости электросопротивления алмазных поликристаллов типа карбонадо, синтезированных при давлениях 6, 9 и 12 ГПа. Использование бориды кобальта в качестве катализатора фазового перехода графита в алмаз позволяет получать алмазные поликристаллы с низкой степенью легирования бором. Увеличение давления при синтезе карбонадо приводит к измельчению алмазных дендритов, но слабо влияет на концентрацию бора в алмазной решетке. Оптимальное сочетание микроструктуры и электропроводности алмаза достигается при давлении синтеза 9 ГПа.

51. Хамаганова Т. Н. Получение и свойства поликристаллов CdV4O7, легированных ионами Cr³⁺ / Т. Н. Хамаганова. – Текст : электронный // Вестник Дальневосточного отделения Российской академии наук. — 2020. – № 3(211). – С. 79–83 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Впервые поликристаллические фазы Cd_{1-x}V₄O₇ : xCr³⁺ (x = 0,03; 0,05 и 0,07) и исходная матрица CdV₄O₇ синтезированы высокотемпературными твердофазными реакциями при 850 °С. Методом РФА показано, что твердые растворы кристаллизуются в ромбической сингонии (пр. гр. Rbca). Методом ДСК определена температура плавления (Т_{пл.} = 974 °С) бората Cd_{1-x}V₄O₇ : 0.03 Cr³⁺. Построением кривых высвечивания в области 20–400 °С проведены термолюминесцентные исследования. Выявлен оптимальный состав люминофора Cd_{1-x}V₄O₇ : 0.03 Cr³⁺ с максимальной интенсивностью свечения.

52. Химическая взаимодействие в системе SrGaSe₂ – SrGa₂Se₄ / Н. И. Ягубов, А. Н. Султанова, С. К. Ефендиева [и др.]. – Текст : электронный // The Scientific Heritage. — 2021. – № 79–2(79). – С. 40–43 // НЭБ eLIBRARY.ru.

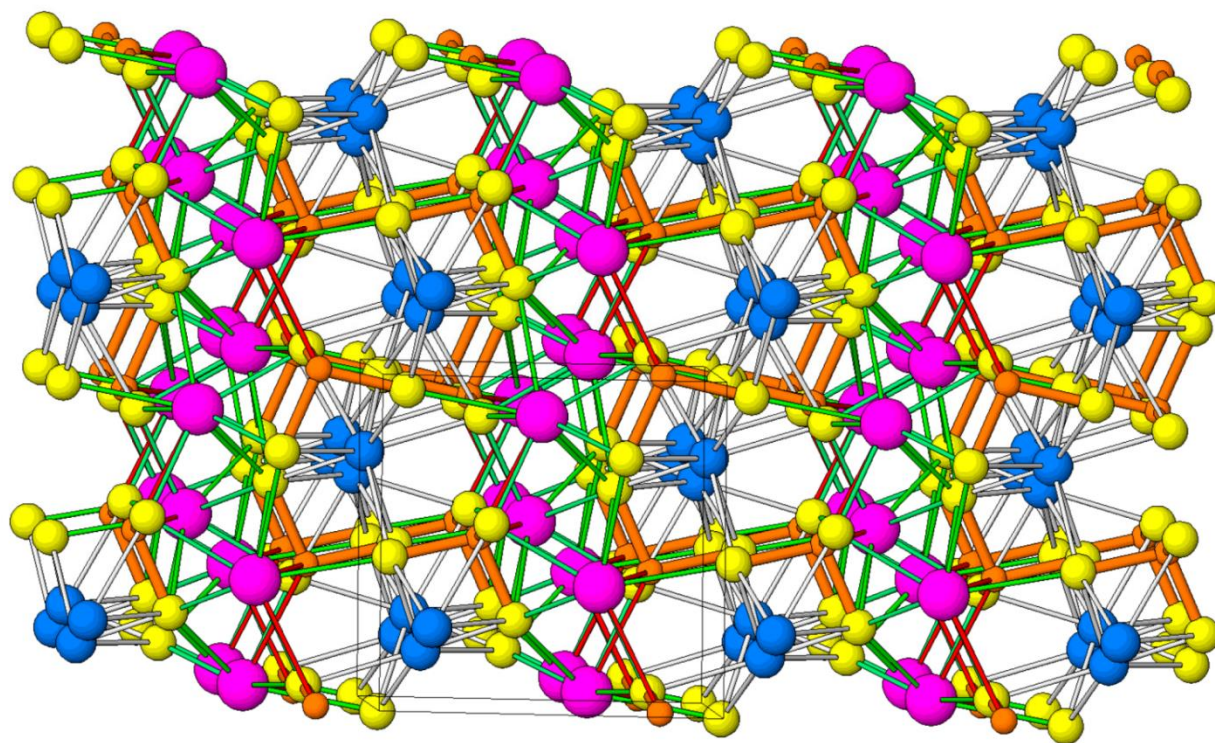
Сплавы разреза SrGaSe₂ – SrGa₂Se₄ были получены прямым ампульным методом и исследованы комплексом методов физико–химического анализа (ДТА, РФА, МСА, химического анализа, а также путем измерения микротвердости и определения плотности SrGaSe₂ – SrGa₂Se₄ построена его Т–Х фазовая диаграмма. Установлено что диаграмма состояния системы SrGaSe₂ – SrGa₂Se₄ является квазибинарным сечением тройной системы Sr–Ga–Se. Изучены температурные зависимости электропроводности, люксамперные характеристики, фотоэлектрические свойства монокристаллов соединения SrGa₂Se₄ и поликристаллов SrGaSe₂

53. Цветков С. В. Нелинейные определяющие соотношения для трансверсально–изотропных материалов классов симметрии C_{∞} и $C_{\infty h}$ / С. В. Цветков. – Текст : электронный // Вестник Московского государственного технического университета им. Н.Э. Баумана. Серия Естественные науки. — 2019. – № 3(84). – С. 46–59 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Трансверсально–изотропные материалы имеют ось симметрии бесконечного порядка. В зависимости от того, какие еще элементы симметрии имеет структура материала, трансверсально–изотропные материалы подразделяют на пять классов. Для таких материалов рассмотрены определяющие соотношения, которые связывают два симметричных тензора второго ранга. Свойства материалов этих пяти классов описаны двумя типами определяющих соотношений. Получено выражение тензорной функции для определяющих соотношений материалов классов C_{∞} и $C_{\infty h}$. При этом использованы следствия из принципа симметрии Кюри. Это позволяет получить полный и неприводимый вид тензорной функции.

54. Червова А. А. Квантовомеханическое описание движения электронов в кристалле / А. А. Червова. – Текст : электронный // Физика в системе современного образования (ФССО–2019) : Сб. научных трудов XV Международной конференции / под редакцией Ю. А. Гороховатский, Л.А Ларченкова ; Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена. – Санкт–Петербург, 2019. – С. 284–288 // НЭБ eLIBRARY.ru.

В статье приводится квантовомеханическое описание движения электрона в кристалле, адаптированное для рассмотрения вопросов зонной теории твердого тела в курсе общей физики вуза для будущих инженеров.



55. Шабловский Я. О. Структурный анализ кристаллических материалов в контексте обратной задачи кристаллохимии / Я. О. Шабловский. – Текст : электронный // Химия, физика и механика материалов. — 2021. – № 2(29). – С. 23–43 // НЭБ eLIBRARY.ru.

Структурная чувствительность свойств материала обуславливается характером анизотропии его строения и, в особенности, уровнем проявления анизотропии – молекулярным, мезоскопическим либо макроскопическим. Поликристалличность большинства технически значимых материалов отнюдь не нивелирует анизотропию зёрен, составляющих материал. Напротив, хорошо известно, что текстурированный поликристалл анизотропен и во многих аспектах сравним с монокристаллом. Наряду с анизотропией, ещё одним фундаментальным свойством кристаллического состояния вещества является его полиморфизм. Обычно полиморфизм материала серьёзно затрудняет его получение и в ещё большей степени – его практическое применение, поэтому в материаловедении полиморфизм расценивается как нежелательное явление. Сущность выдвигаемого подхода заключается в том, чтобы использовать закономерности этого явления для решения обратной задачи кристаллохимии. А именно, предлагается руководствоваться преемственностью кристаллических структур, анализируя их на основе результатов экспериментального исследования индикативных свойств. Нами рассмотрены индикативные кристаллохимические свойства для разных типов материалов. Особое внимание уделено первичным и средним ферроикам.