ЯковенкоОлексійМихайловичінженеркатегоріїкафедрифізичноїхіміїхімічногофакультетуКиївськогонаціональногоуніверситетуіменіТарасаШевченкаНазвадисертаціїРентгенографічнедослідженняструктурирозплавівШифртаназваспеціальностіфізичнахіміяСпецрадаДКиївськогонаціональногоуніверситетуіменіТарасаШевченка

КиївськийнаціональнийуніверситетіменіТарасаШевченка

МіністерствоосвітиінаукиУкраїни

КиївськийнаціональнийуніверситетіменіТарасаШевченка

МіністерствоосвітиінаукиУкраїни

Кваліфікаційнанауковапраця

направахрукопису

ЯКОВЕНКООЛЕКСІЙМИХАЙЛОВИЧ

УДК

ДИСЕРТАЦІЯ

РЕНТГЕНОГРАФІЧНЕДОСЛІДЖЕННЯСТРУКТУРИРОЗПЛАВІВ



–Фізичнахімія

Подаєтьсяназдобуттянауковогоступенякандидатахімічнихнаук

ДисертаціяміститьрезультативласнихдослідженьВикористанняідей

результатівітекстівіншихавторівмаютьпосиланнянавідповіднеджерело

ЯковенкоОМ

Науковийкерівник

РоїкОлександрСергійович

докторхімічнихнаукдоцент

Київ

ЗМІСТ

АНОТАЦІЯ…………………………………………………………………

Списокопублікованихпрацьзатемоюдисертації………………………

ПЕРЕЛІКУМОВНИХПОЗНАЧЕНЬТАСКОРОЧЕНЬ…………………

ВСТУП………………………………………………………………………

РОЗДІЛОГЛЯДЛІТЕРАТУРИ…………………………………………

Структуратавластивостіподвійнихсистем…………………………………………………………………………



……………………………………………………………………

……………………………………………………………………

……………………………………………………………………

…………………………………………………………………

…………………………………………………………………

Структуратавластивостіпотрійнихсистем……………

…………………………………………………………………

………………………………………………………………

РОЗДІЛМЕТОДИДОСЛІДЖЕННЯТАМОДЕЛЮВАННЯ…………

Приготуваннязразківтаметодикависокотемпературного

рентгенографічногодослідження



Отриманнятадослідженняшвидкозагартованихстрічок……………

МоделюванняструктурирозплавівметодомОберненогоМонте

Карлотааналізструктурнихмоделей………………………………………



РОЗДІЛАТОМНАСТРУКТУРАДОСЛІДЖЕНИХРОЗПЛАВІВ……

Атомнаструктурарозплавів……………………………………

Атомнаструктурарозплавів…………………………………

Атомнаструктурарозплавів…………………………………

РОЗДІЛФАЗОВИЙСКЛАДТАМІКРОСТРУКТУРА

ЗАГАРТОВАНИХІВІДПАЛЕНИХСТРІЧОК……………



Стрічкиотриманізагартуваннямрозплавів………………

Стрічкиотриманізагартуваннямрозплавів………………

ВИСНОВКИ…………………………………………………………………

СПИСОКВИКОРИСТАНИХДЖЕРЕЛ……………………………………

ДОДАТКИ……………………………………………………………………



ПЕРЕЛІКУМОВНИХПОЗНАЧЕНЬТАСКОРОЧЕНЬ

ДСК–диференційнаскануючакалориметрія

КІ–криваінтенсивності

КЧ–координаційнечисло

ОМК–методоберненогоМонтеКарло

ПВ–поліедрВороного

РФА–рентгенофазовийаналіз

СФ–структурнийфактор

ТЕМ–трансмісійнаелектроннамікроскопія

ФПРА–функціяпарногорозподілуатомів

ФРРА–функціярадіальногорозподілуатомів

–перехіднийметал



ВСТУП

Актуальністьтеми

Композиційніматеріалинаосновісплавівалюмініювжедовгийчасє

незаміннимивпромисловостізавдякинизькійгустинітависокійкорозійній

стійкостіприекстремальнихтемпературахСереднайбільшпоширенихварто

відзначитигруписплавівнікельалюмінійякіотрималиназвусуперсплавита

залізоалюмінійВажливоютехнологічноюзадачеюєз’єднаннядеталейзтаких

сплавівуготовийвирібщоможназробитизадопомогоюдифузійного

зварюванняприякомупроміжнийматеріалзакладаєтьсяміжокремими

деталямиінагріваєтьсяпротягомкороткогочасуЗавдякиутвореннюглибоких

евтектикзалюмініємзалізомнікелемівластивостізнижуватитемпературу

плавленняперспективнимваріантомдлявикористанняяктакогоматеріалує

германійВказанатехнологіяпередбачаєґрунтовнізнаннящодовластивостей

речовиниякурідкомустанітакіутвердійфазіНезаміннимінструментомпри

дослідженніособливостейвпорядкуваннянамікрорівнієрентгенографічне

дослідженнярезультатиякогоєнадійнимпідґрунтямдляцілоїнизки

теоретичнихметодівзокремареконструкціїтривимірнихмоделейструктуриза

допомогоюметодуОберненогоМонтеКарлоОМКзподальшиманалізом

статистичногеометричнимметодомВороногоДелоне

Порівняноновимкласомматеріалівєкомпозитищоотримуютьіз

швидкозагартованихалюмінієвихсплавівДосягненняповноїаморфності

матеріалуможливепривикористанніметодівщозапобігаютькристалізації

внаслідоквисокихшвидкостейохолодженнярозплаву

КсПеревагою

методуспінінгуваннярозплавунаміднийдискщообертаєтьсяєотримання

довгихстрічоктовщиноюдесяткиісотнімікронівякіможнавикористовувати

безпосередньодляобмотокконденсаторівабоформувативиробидовільної

формипісляподрібненняпресуванняівідпалудрібнодисперсногопорошкупри

заданійтемпературіРозумінняпроцесівкристалізаціїметалічнихстеколна

основіалюмініюважливедляконтролюмікроструктуриматеріалуіотримання

деталейзбажанимивластивостями



ВраховуючипроведеніранішенакафедріфізичноїхіміїКиївського

національногоуніверситетудослідженняструктурирозплавівтаТМ

логічнимнапрямкомпродовженнянауковихпошуківєвстановлення

закономірностейзміниструктурирозплавівпризамінікремніюнагерманій

Отжеактуальністьроботиполягаєувстановленнівпливухімічноїприроди

тавмістукомпонентіврозплавівнаструктуруякв

рідкомутакіушвидкозагартованомутакристалічномустанах

Зв’язокроботизнауковимипрограмамипланамитемами

Дисертаційнуроботубуловиконаноувідповідностідодержбюджетнихтем

№БФ“Фізикохіміяметаловміснихтавуглецевихнаноматеріалівдля

сучаснихтехнологійвирішенняекологічнихпроблем”№держреєстрації

рр№БФ“Новіфункціональнінаноматеріали

інанокомпозитинаосновігетерометалічнихсистем”№держреєстрації

рр

МетаізадачідослідженняМетоюдисертаційноїроботибуло

експериментальнедослідженняструктурирозплавівтаотриманнякоректнихструктурнихмоделейзадопомогоюметоду

ОберненогоМонтеКарловстановленняспорідненостіміжупорядкуванням

атомівурозплавахтатвердихфазах

Длядосягненняпоставленоїметибуловизначенотарозв’язанотакізадачі

проведенорентгенографічнедослідженняувсьомуконцентраційному

діапазоніташирокомутемпературномуінтервалірозплавівзвмістом

атсклади





склади





звикористанням

монохроматизованогоαвипромінювання



задопомогоюметодуоберненогоМонтеКарлореконструйованотривимірні

моделідослідженихрозплавівтапроведеноїханаліззвикористанням

статистичногеометричногометодуВороногоДелонепарціальнихфункцій

структурногофактораіпарногорозподілуатомів

проведенорентгенофазовийаналізтвердихсплавівсистемта



здійсненошвидкезагартуваннярядурозплавівпотрійнихсистем

методомспінінгуваннявизначеноїхфазовийскладтермічну

стабільністьвпливумовзагартуваннятахімічногоскладуназдатністьдо

аморфізації

Об’єктдослідження–атомнаструктураподвійнихтапотрійнихрозплавівїївзаємозв’язокізвідповіднимистабільнимита

метастабільнимифазамиутвердомустані

Предметдослідження–сплавитарозплавиподвійноїсистемиі

потрійнихсистемтааморфнітананокристалічністрічки

МетодидослідженняДляекспериментальногодослідженнярозплавів

буловикористанометоддифракціїрентгенівськихпроменівмоделювання

структуриздійснювалосьзадопомогоюметодуоберненогоМонтеКарло

ОМКОтриманітривимірнімоделібулипроаналізованістатистичногеометричнимметодомВороногоДелонетавикористанідлярозрахунку

парціальнихфункційструктурногофактораіпарногорозподілуатомів

Встановленняскладузразківутвердомустанібулоздійсненезадопомогою

рентгенофазовогоаналізуРФАструктурааморфнихнанокристалічних

стрічоктаїхтермічнастабільністьбуладослідженізвикористаннямРФА

трансмісійноїелектронноїмікроскопіїТЕМдиференціальноїскануючої

калориметріїДСК

Науковановизнаодержанихрезультатів

Впершеврамкаходногодослідженняотриманоданірентгенографічного

експериментудлярозплавівсистемиувсьомуконцентраційному



діапазоніпритемпературахнаКвищелініїліквідусіКдлярозплавів

затпритемпературахдоКВстановлено

мікронеодноріднубудовурозплавівізскладовимикомпонентами

типівкластериізструктуроюрідкогогерманіютамікроугруповання

ідентичнірозплавузат

Впершепроведенорентгенографічнедослідженнярозплавіву

всьомуконцентраційномудіапазоніприрізнихтемпературахВстановлено

мікронеодноріднубудовурозплавіввсерединіобласті

внаслідокприсутностікластерівізструктуроюрідкогогерманіюЗа

межамивказаноїобластіструктурарозплавувизначаєтьсявзаємодіямиу

парахатомівта

Знайденотриновіфазиусистемігексагональна𝜏

′

нм

нмтетрагональна𝜏

′

нмнм

гексагональна𝜏

′

анмснм

Впершепроведенорентгенографічнедослідженнярозплавіву

всьомуконцентраційномудіапазоніприрізнихтемпературахВстановлено

визначальнийвпливнікелюнаформуванняближньогопорядкуврозплаві

Ідентифікованоутворенняметастабільноїфазипризагартуванні

розплавівтаіметастабільноїпотрійноїфазипри

загартуваннірозплаву

Показанощобільшвисокаінтенсивністьміжатомнихвзаємодійурозплавах

призводитьдогіршоїздатностідоаморфізаціїпришвидкому

загартуванніупорівняннізрозплавами

Практичнезначенняодержанихрезультатів

Проведенеурамкахдисертаційноїроботидослідженнямає

фундаментальнийхарактерОтриманірезультатианалізулокальноїструктури

розплавівдозволяютьпрогнозуватискладутвердомустанітайоговластивості

Встановленізакономірностіщодотермічноїстабільностіметастабільнихфаз



отриманихпризагартуваннірозплавівможутьбутивикористаніприрозробці

новихкомпозиційнихматеріалів

ОсобистийвнесокздобувачаДисертантомособистобулопроведено

літературнийпошукмоделюванняструктуриподвійнихтапотрійнихрозплавів

методомОМКтааналізметодомВороногоДелонеПостановказадач

плануванняекспериментальнихдослідженьаналізданихобговорення

отриманихрезультатівтависновківбулопроведеноспільнознауковими

керівникамидхнпрофКазіміровимВПтадхндоцРоїкомОС

Основниймасивекспериментальнихданихбулоотриманопідчас

високотемпературнихрентгенівськихдослідженьрозплавівсумісноздхндоц

РоїкомОСтадхнстнсСокольськимВЕЧастинакривихінтенсивності

розсіюваннярентгенівськоговипромінюваннявідрозплавівбулиотримані

стінжЯлтанськимСПАморфнітананокристалічністрічкибулиотримані

спільнознсКупрінимВВІнститутпроблемматеріалознавстваім

ІМФранцевичаНАНУРентгенофазовийаналізшвидкозагартованихстрічок

булопроведеноспільнозкандфізматнаукЗелінськоюГМІнститут

металофізикиімГВКурдюмоваНАНУУреконструюваннітривимірних

моделейрозплавівметодомОМКбралиучастьстудентиСтараАА

БіловодськаООПівницькаВОГигинякВВВстановленнямікроструктури

стрічокбулоздійсненоспільноізкандфізматнаукКоткомАВІнститут

проблемматеріалознавстваімІМФранцевичаНАНУОбговореннявпливу

термодинамічнихвластивостейнаструктурурозплавівбулопровдеенозканд

хімнаукГоловатоюНВТермічніперетворенняушвидкозагартованихстрічках

досліджувалисьметодомДСКсуміснозкандфізматнаукМікоюТМ

АпробаціярезультатівдисертаціїОсновнірезультатироботибули

представленінаміжнароднихконференціяхміжнароднаконференція

студентівтааспірантів“Сучасніпроблемихімії”рКиївміжнародна

конференціястудентівтааспірантів“Сучасніпроблемихімії”рКиїв

“”рКиїв



міжнароднаконференціястудентівтааспірантів“Сучасніпроблемихімії”

рКиїв“

”рКиїв

“”рЛьвів

ПублікаціїЗатемоюдисертаційноїроботиопублікованостатейу

фаховихжурналахтатездоповідейнаконференціях

СтруктураіобсягдисертаціїДисертаціяскладаєтьсязанотаціїзмісту

перелікуумовнихпозначеньвступучотирьохрозділіввисновківсписку

використанихджерелнайменуваньтадодатківЗагальнийобсягдисертації

–сторінокНауковийрукописміститьтаблицьтарисунків

ВИСНОВКИ

Здійсненорентгенодифракційнедослідженнярозплавів

вширокомуконцентраційномуінтерваліНаосновіекспериментальних

данихотриманоконцентраційнізалежностіструктурнихпараметрівлокального

атомноговпорядкуваннядослідженихрозплавівпридекількохтемпературах

Встановленомікронеодноріднубудовурозплавівпритемпературах

наКвищелініїліквідуспривмістігерманіювищеатскладовимиякої

ємікроугрупованнязіструктуроюпотипурідкогогерманіюта

мікроугрупованнярозплавуЛокальнаатомнаструктурарозплавів

тахарактеризуєтьсяодноріднимрозподіломатоміву

матриціалюмініюПринагріванніобластьіснуваннярозплавівз

мікронеоднорідноюструктуроюскорочуєтьсяапритемпературівищеК

одноріднийрозчинформуєтьсяувсьомуконцентраційномудіапазоні

Показанощозагальноюхарактеристикоюпотрійнихрозплавівє

пріоритетнарольвзаємодійтаприформуванніближнього

порядкуКонкуренціяміжатомамитаприформуваннялокального

атомногооточенняприводитьдопоступовоговитісненнягерманіюза

межінайближчогооточеннязподальшимформуваннямкластерівіз

структуроюпотипурідкогогерманіюПоказанощогерманійудосліджених

потрійнихрозплавахприсутнійудвохструктурнихстанах–влокальному

оточенніатомівтаватомнихкластерахізструктуроюпотипурідкого

германіющоприводитьдомікронеоднорідноїбудовирозплавупривідносно

високомувмістіВстановленоконцентраційнідіапазонирозплавівз

мікронеоднорідноюбудовоюудослідженихпотрійнихсистемах

Встановленощодлявсіхдослідженихрозплавіввиконується

співвідношеннядлянайбільшймовірноїнайближчоїміжатомноївідстані

Вказанаособливістьобумовлена

енергетичноюнееквівалентністюміжатомнихвзаємодійврезультатірізної

акцептуючоїздатностіатомівтаЯкнаслідокефектконкуренціїпри



формуваннімікронеоднорідноїструктуриурозплавахвиявляєтьсяпри

меншомувмістіперехідногометалупорівняноіз

Здійсненорентгенофазоведослідженнясплавівотриманих

прирівномірномуохолодженнітазагартуванніІдентифікованотриновіфазиу

системігексагональну𝜏

′

нмнмтетрагональну

𝜏

′

нмнмгексагональну𝜏

′

анмс

нмУсистемізафіксованоформуванняметастабільноїфазипри

загартуваннірозплавівтаатакожневідомої

метастабільноїфазипризагартуваннірозплавуу

Показанощодляформуванняаморфноїфазиізрозплавів

необхіднозбалансувативзаємодіїтащовідповідаєпевному

оптимальномувмістуУвипадкурозплавівмаємісцебільша

енергетичнанерівноцінністьузв’язкахтащонегативновпливаєна

аморфізуючуздатністьупорівняннізрозплавомЯкрезультат

повністюаморфнустрічкуотриманолишедляскладу