Міністерство освіти і науки України
Львівський національний університет імені Івана Франка
Фізичний факультет
Кафедра фізики металів

# МАГІСТЕРСЬКА РОБОТА

## Структура розплаву Al-Ni-Si

Виконав студент групи ФзФ-62
Спеціальності 104
Фізика та астрономія
Труба В.М.

Науковий керівник:
проф. Мудрий С.І.

Рецензент:
проф. Павлюк В.В

**Львів-2022**

**Анотація**

Методом дифракції рентгенівських променів проведено дослідження структури розплаву Al-Ni-Si. Аналіз структурних факторів, розрахованих з кривих інтенсивності дифрагованого випромінювання дозволив встановити існування мікронеоднорідної структури, елементами якої є чисті компоненти і хімічно впорядковані групи атомів.

**Summary**

Structure of $Cu_{0,70}Si_{0,30}$, eutectic molten alloy has been studied by means of X-ray diffraction method. Analysis of structure factors calculated from scattered intensity allowed us to conclude the existence of inhomogeneous structure, which consists of pure elements and chemically ordered atomic groups.

# Зміст

**Вступ** _____ **4**

**I. Особливості теорії рідкого стану речовини** _____ **6**

1.1 Будова і властивості рідин _____ **6**

1.2. Функції радіального розподілу в теорії рідин _____ **9**

1.3. Рентгенографічне дослідження евтектик _____ **13**

**II. Структура металічних розплавів** _____ **16**

2.1. Ближній порядок рідкого Al та властивості Ni і Si _____ **16**

2.2. Вплив домішок на структуру алюмінієвих розплавів _____ **20**

**III. Методика експерименту** _____ **27**

3

**Висновки** _____ **38**

**Список літератури** _____ **39**

**Додаток** _____ **41**

# Вступ

Важливе теоретичне і практичне значення питання про структуру і властивості розплавів на основі алюмінію, про механізми евтектичних перетворень, а також про природу евтектик, зумовили великий і стійкий інтерес до нього дослідників в різних країнах.

Інтерес до евтектичних сплавів росте завдяки їхньому практичному застосуванню в різних галузях промисловості. Маючи низьку температуру плавлення, ці сплави часто використовують як припої, при литті, для створення композитних матеріалів. З моменту появи металічних аморфних твердих тіл інтерес до рідких евтектичних сплавів зріс суттєво. Як відомо деякі металічні сплави можуть бути аморфізовані шляхом охолодження з рідини, особливо ті, склад яких знаходяться близько до складу “глибоких" евтектитчних точок на фазових діаграмах рівноваги. Для вдосконалення властивостей одержаних в такий спосіб аморфних речовин, часто застосовується їх легування іншими елементами. Внесення в рідку евтектику певних елементів значно змінює властивості загартованих твердих сплавів, не дивлячись на те, що їх відсотковий вміст може бути зовсім малим. Домішки також потрібні для одержання нанокристалів шляхом відпалу аморфної фази, що дає можливість впливати на процеси формування структури. Таким чином важливо вивчити те, як різні домішки впливають на структуру сплаву в рідкому стані. Це є причиною, чому вивчення стабільності структури рідких евтектик від домішок інших елементів є цікавою проблемою.

Багато дифракційних досліджень і вимірювань фізичних величин а також роботи присвячені порівнянню структури і властивостей евтектичних сплавів в твердому і рідкому стані показали існування мікронеоднорідного близького порядку в рідких евтектичних сплавах при температурі близькій до температури кристалізації і характеризуються наявністю тенденції до утворення самоасоційованих груп атомів. Атоми кожного елементу не

розподілені статистично а переважає сусідство однакових атомів. Така переважаюча атомна взаємодія веде до формування мікросегрегації в структурі. Як було показано з допомогою нейтронного малокутового розсіяння і комп'ютерного моделювання структурні одиниці мають нанорозміри. Як випливає з дифракційних даних, розмір структурних одиниць або кластерів зменшується з температурою. З нагріванням розплавлені евтектичні сплави намагаються утворити статистичний атомний розподіл до деякої визначеної температури, розплави є структурно негомогенними. Іншими словами рідкі евтектичні сплави можна розглядати як розчин, який стає атомним розчином тільки при деякому перегріві відносно точки кристалізації.

## *Розділ І.* **Особливості теорії рідкого стану речовини**

### *1.1. Будова і властивості рідин*

Рідкий стан речовини є проміжним між твердим і газоподібним (рис.1). Область існування рідини обмежена з боку низьких температур переходом в твердий стан (точки *cdd'* ), а з боку високих - переходом в газоподібний стан (точки c, e). Лінія АК, що розділяє рідку і газоподібну фази закінчується критичною точкою, що відповідає температурі $T_{кр}$ і тиску $p_{кр}$, вище яких неможливе існування рідини в рівновазі з парою. Лінія рівноваги рідина - тверда фаза критичної точки не має. Точка А на діаграмі стану відповідає температурі і тиску, при яких в закритій посудині знаходяться в рівновазі тверда, рідка і газоподібна фази.

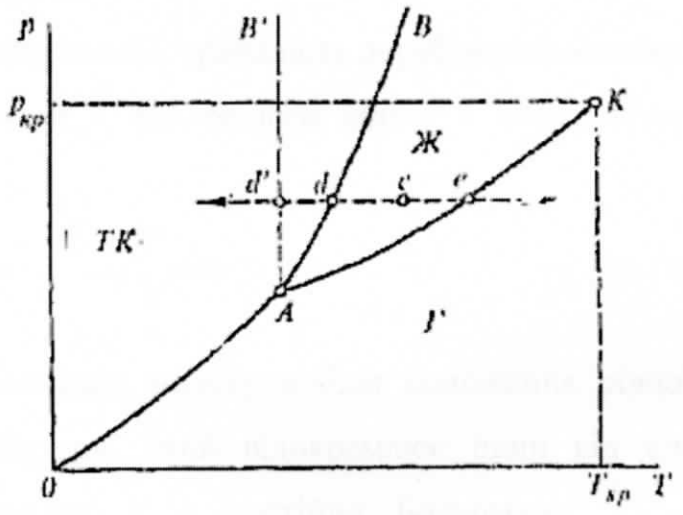



Рис.1.

Рідини, як проміжний стан, поєднують деякі властивості як твердих тіл, так і газів. Кристалічні тіла, як відомо, володіють ближнім і дальнім порядками. Ближній порядок означає правильне розташування біля фіксованого атома, іона або молекули певного числа найближчих сусідів. Дальнім порядком називається розташування частинок в певній послідовності з утворенням єдиних тривимірних граток. Рідини, на відміну від кристалів мають лише ближній порядок.

Рідина - динамічна система. Атоми або молекули, зберігаючи ближній порядок у взаємному розташуванні, беруть участь в тепловому русі, який складніший, ніж в кристалі. Атоми і молекули рідини здійснюють коливання, як в кристалах, але положення рівноваги, щодо яких відбуваються ці коливання, не залишаються фіксованими. Зробивши деяке число коливань біля одного положення рівноваги, молекули переміщаються в сусіднє положення, обумовлюючи явище дифузії.

Переміщення молекул з одного рівноважного положення в інше може відбуватися: а) стрибком на відстань $R_1$, близьку до середнього міжмолекулярного, і б) плавно разом з їх найближчим оточенням. У молекулах, що містять одинарні і подвійні зв'язки, можливі повороти атомів або груп атомів навколо цих зв'язків, що приводить до утворення ізомерів даної хімічної сполуки.

Згідно Я. І.Френкелю, тривалість перебування молекули в тимчасовому положенні рівноваги - час осілого життя - визначається з допомогою формули

$$\tau = \tau_0 e^{U/(kT)} \qquad (1.1)$$

де $\tau_0$ - період коливань молекули біля положення рівноваги; U - висота потенціального бар'єру, який відокремлює один від одного два сусідні положення рівноваги; k - постійна Больцмана; T - термодинамічна температура. Числове значення $\tau$ залежить від будови і в'язкості рідини.

Згідно висловлювання Я. Френкеля, молекули в рідині ведуть в основному осілий спосіб життя, що є характерною межею рідкого стану, що зближує його з твердим тілом, з тією різницею, що в твердих тілах час осілого життя значно більший, ніж в рідинах. Із зростанням температури час осілого життя молекул в тимчасовому положенні рівноваги зменшується, відмінність між $\tau$ і $\tau_0$ поступово зникає. При цьому роль поступального руху молекул посилюється, а коливального - ослабляється, структура рідини все більш наближається до газової.

По теорії Я. І. Френкеля, у випадку простих рідин, через час осілого життя визначаються:

а) середня швидкість переміщення молекул рідини

$$D = \frac{R_1}{6\tau} = v = \frac{R1}{\tau} = \frac{R_1}{\tau_0} e^{-U/(kT)} \qquad (1.2)$$

б) самодифузія, що характеризує швидкість взаємного перемішування молекул

$$D = \frac{R_1}{6\tau} = \frac{R_1}{6\tau_0} e^{-U/(kT)} \qquad (1.3)$$

в) в'язкість, що характеризує передачу імпульсу молекулами рідини

$$\eta = \frac{\kappa T}{\pi r R_1^2} \tau_0 e^{U/(kT)} \qquad (1.4)$$

Приведені формули відображають активаційний (стрибковий) характер руху молекул. Досвід показує, що в рідинах молекули можуть переміщатися безперервно по траєкторіях дрейфу, без раптових стрибків. Такий тип руху домінує в зріджених інертних газах і в розплавлених металах. У асоційованих рідинах (наприклад, воді) вірогідніший стрибковий характер переміщення молекул.

У рідинах на відміну від газів домінують ті ж міжмолекулярні сили тяжіння, які обумовлюють той або інший тип зв'язку в кристалі. Так, наприклад, між атомами зріджених інертних газів діють ван-дер-вальсові сили. Ті ж сили викликають взаємне тяжіння молекул неполярних рідин. Молекули води, кислот жирного ряду і спиртів взаємодіють один з одним за допомогою водневих зв'язків, виникнення яких пов'язане з наявністю в їх складі гідроксильних груп ОН. У розплавах солей діють електростатичні сили тяжіння, в металах - сили металевого зв'язку.

У рідкому германії, кремнії і інших напівпровідникових речовинах разом з металевим зв'язком частково зберігається ковалентний зв'язок. Кожна

група рідин володіє специфічним ближнім порядком, успадкованим від твердого тіла. Невелика відмінність щільності рідин і кристалів, їх питомих теплоємкостей і коефіцієнтів об'ємного розширення, з одного боку, вказує на істотну відмінність теплоти плавлення і паротворення, а з іншої — на те, що рідини по характеру взаємного розташування частинок, їх динаміці і взаємодії ближче до твердого, а не газового стану речовини. Я. І. Френкель писав, що зближення рідин з реальними газами допустимо лише у разі, коли рідина знаходиться при високих температурах, близьких до критичної, і володіє малою щільністю. З іншого боку, безперечним фактом є схожість їх з твердими тілами при температурах, близьких до температури кристалізації. Будучи фазою, проміжною між твердою і газоподібною, рідина, природно, виявляє безперервну гамму перехідних властивостей, примикаючи в області високих температур і великих питомих об'ємів до газів, а в області низьких температур і малих питомих об'ємів - до твердих тіл.

Особливості аморфного стану полягають у відсутності дальнього порядку і природної ізотропії властивостей. По структурі аморфні тіла нагадують рідини, а по характеру теплового руху - кристали.

Аналогія між структурами аморфних тіл і рідин не означає ідентичності ближнього порядку, що існує в них. Так, наприклад, рідкий кремній і германій мають ближній порядок, істотно відмінний від ближнього порядку в аморфному стані. В той же час структура ланцюжка селену і теллура зберігається при переході з аморфного стану в рідкий.

### *1.2. Функції радіального розподілу в теорії рідин*

Є принципова можливість побудувати строгу статистичну теорію рідин без будь-яких додаткових апріорних припущень. Ця можливість зв'язана з колосальними математичними труднощами і до теперішнього часу не може бути представлена в строго завершеному вигляді. У основі теорії

лежить метод молекулярних функцій розподілу або так званих корелятивних функцій.

Вірогідність знаходження частинки рідини в якій-небудь точці займаного рідиною об'єму в даний момент часу залежить від положення всіх інших частинок. Ця імовірнісна залежність між взаємним розташуванням молекул, кількісно характеризується корелятивними функціями розподілу.

Якщо розглядати при постійній температурі рівноважну систему з $N$ частинок і вибрати усередині неї довільну групу з S частинок (S = 1, 2, 3...), то вірогідність $dW(\vec{r}_1;\vec{r}_2;...;\vec{r}_s)$ виявити частинки цієї групи відповідно в малих об'ємах $(d\vec{V}_1;d\vec{V}_2;...,d\vec{V}_s)$ поблизу точок $\vec{r}_1,\vec{r}_2,...,\vec{r}_s$ при довільних положеннях всіх інших частинок системи рівна

$$dW(\vec{r}_1,\vec{r}_2,...\vec{r}_S)=\frac{1}{V^S}F_S(\vec{r}_1,...\vec{r}_S)dV_1...dV_S \qquad (1.5)$$

де V – об'єм , займаний групою з S - частинок. $dV_i = dx_i dy_i dz_i$, $x_i, y_i, z_i$ – координати і-ої частинки.

Функція $F_S(\vec{r}_1,\vec{r}_2,...\vec{r}_s)$ називається корелятивною функцією S-го порядку. Вона визначає густину імовірності заданої конфігурації.

Корелятивна функція характеризує кореляцію в розміщенні атомів в рідині, яка обумовлена силами міжчастинкової взаємодії. Якщо б частинки не взаємодіяли між собою, тобто були б незалежними, то імовірність конфігурації такої системи дорівнювала б добутку

$$dW(\vec{r}_1,\vec{r}_2,...\vec{r}_S)=dW(\vec{r}_1)dW(\vec{r}_2)...dW(\vec{r}_S), \qquad (1.6)$$

де $dW(\vec{r}_i)$ – ймовірність знаходження частинки і в об'ємі $dV_i$ поблизу точки $r_i$ при довільному розміщенні інших частинок. Вона дорівнює відношенню об'єму, що займає частинка і, до об'єму всієї системи. В цьому випадку

$$dW(\vec{r}_1,\vec{r}_2,...\vec{r}_S)=\frac{1}{V^S}dVdV_{21}...dV_S \qquad (1.7)$$

і, відповідно, $F_S(\vec{r}_1,...,\vec{r}_S)=1$. Таким чином, для системи взаємодіючих частинок, корелятивні функції $F_S(\vec{r}_1,...,\vec{r}_S)$ являють собою міру впорядкування в розміщенні атомів (при S >1).

Найпростішою корелятивною функцією є унарна функція $F_1(\vec{r}_1)$. Її фізичний зміст полягає в тому, що

$$dW(\vec{r}_1) = F_1(\vec{r}_1)\frac{dV_1}{V} \qquad (1.8)$$

визначає ймовірність знаходження деякої частинки системи в елементі об'єму $dV_1$ на відстані $r_1$ від початку координат при довільному розміщенні інших N-1 молекул. У випадку простих рідин $F_1(\vec{r}_1)$ є функцією тільки відстані до даної частинки. В анізотропних рідинах положення будь-якої частинки задається модулем вектора $r_1$ і його напрямом.

Якщо у взаємодії беруть участь дві молекули системи, то ймовірність знаходження їх на певній відстані одна від одної визначається величиною

$$dW(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = F_2(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\frac{dV_1 dV_2}{V^2} \qquad (1.9)$$

де $F_2(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ – бінарна функція розподілу (густина ймовірності для двох молекул).

Якщо одночасно взаємодіють три молекули системи, то ймовірність знаходження їх в елементах об'єму $dV_1$, $dV_2$, $dV_3$ з векторами $\vec{r}_1,\vec{r}_2\,\vec{r}_3$ задається формулою

$$dW(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{r}_3) = F_2(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{r}_3)\frac{dV_1 dV_2 dV_3}{V^3} \qquad (1.10)$$

де $F_2(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{r}_3)$ – тернарна функція розподілу.

Корелятивні функції залежать від температури, тиску, характеристик зовнішніх полів, якщо останні накладені на рідину.

Повний опис всіх фізичних властивостей і молекулярної структури рідини можна отримати, якщо відомі усі корелятивні функції $F_s$ для S = 1,2,3, … Проте виявилось, що в багатьох випадках достатньо знати лише невелике число корелятивних функцій з малим S.

У випадку однорідної ізотропної одноатомної рідини, яка знаходиться в стані спокою, унарна корелятивна функція $F_1(\vec{r})$ дорівнює одиниці, оскільки в цьому випадку всі положення частинки рівноймовірні. В такій рідині розподіл частинок поблизу будь-якої довільно вибраної частинки буде сферично симетричний. Тому бінарна корелятивна функція в цьому випадку буде залежати тільки від одного параметра – відстані між частинками

$$F_2(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = g(r) \qquad (1.11)$$

Функція g(r) називається радіальною функцією атомного розподілу і може бути знайдена експериментально методами рентгено- електроно- и нейтронографії. Вона визначає імовірність $dW(r)$ знаходження будь-якої частинки в сферичному шарі товщиною dr на відстані r від деякої іншої фіксованої частинки, центр якої вибраний за початок координат:

$$dW(r) = g(r)\frac{4\pi r^2}{V}, \qquad (1.12)$$

де V – об'єм системи.

В ідеальному газі функція g(r) дорівнює одиниці на віддалях дещо більших від атомного діаметра. У твердих тілах g(r) має вигляд δ – функції і залежить від кристалографічного напряму. Для рідин g(r) неперервна і характеризується затухаючими осциляціями стосовно одиниці. Максимум осциляцій відповідають найбільш імовірним міжатомним відстаням. У структурному аналізі рідин часто користуються функцією розподілу атомної густини ρ(r). Ця функція зв'язана з g(r) співвідношенням:

$$\frac{N}{V}g(r) = \rho(r). \qquad (1.13)$$

Якщо в розподілі атомів відсутнє упорядкування, то $\rho(r) = \frac{N}{V} = \rho_0$ ($\rho_0$ – середня атомна густина речовини). Добуток $4\pi r^2\rho(r)dr$ виражає число атомів у кульковому шарі товщиною dr , який знаходиться на відстані r від фіксованого початку координат. Величина $4\pi r^2\rho(r)$ називається функцією атомного розподілу. Ця функція дає змогу визначити структурні характеристики розплаву, а саме: координаційне число і найбільш імовірну

відстань між атомами $r_1$ . Для рідких металів положення першого максимуму кривої $4\pi r^2\rho(r)$ це значення $r_1$, а площа під ним, чисельно дорівнює координаційному числу.

### *1.3. Рентгенографічне дослідження евтектик*

Аналіз діаграм стану свідчить, що лише в декількох випадках компоненти сплаву є компонентами евтектики. До них можна віднести системи вісмут-цинк, галлій-германій, галлій-олово і деякі інші (цей випадок не зовсім достовірний). У решті випадків же компоненти евтектики - це або тверді розчини, або з'єднання.

При рентгенографічному дослідженні простих евтектик в рідкому стані інтерпретація кривих радіального розподілу, як вже було відмічено, проводиться звичайними методами. У разі складних евтектик необхідно враховувати наявність областей із структурою з'єднань або твердих розчинів, які відрізняються від структури компонент сплаву, тобто при розрахунках необхідно виходити з компонентів, складових евтектику, а не з компонентів сплаву.

**Прості евтектики**. З великої кількості усіх простих евтектиків у рідкому стані до теперішнього часу досліджено не дуже й багато. Велика частина дослідів виконана при одній температурі, що значно знижує цінність результатів.

Перші роботи по рентгенографічному дослідженню рідких сплавів евтектичної концентрації належать В. І. Данілову і В. І. Радченко. На основі мікрофотометричних кривих вони зробили вивід про наявність впорядкованого розміщення атомів в рідких евтектичних сплавах. Крім того, в їх роботах вперше показано, що крива інтенсивності розсіяння рентгенівських променів рідкими евтектичними сплавами нагадує криву, отриману підсумовуванням, з урахуванням концентрації кривих інтенсивності чистих компонентів. Цей факт пояснюється наявністю в рідких евтектичних

сплавах областей із структурою чистих компонент сплаву. Надалі в простих евтектиках це підтвердилося, але, зрозуміло, не знайшло підтвердження для складних евтектик, оскільки в цьому випадку компоненти сплаву не можна ототожнювати з компонентами евтектики.

| Евтектика | $t, {}^0C$ | $r, \overset{0}{A}$ | Координаційне число | | | Література |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | $n_A$ | $n_B$ | $\bar{n}_0$ | |
| Bi—Pb | 125 | 3,45 | 7 | 11 | - | [1] |
| Bi—Sn | 150<br>400 | 3,30<br>3,50 | 8 | 10 | | [2] |
| Sn—Zn | 300<br>500 | 3,20<br>3,10 | 9,5<br>7,0 | 10<br>8 | | [3] |
| Sn-Pb | 200 | 3,26 | 8 | 10 | | [4] |
| Sn—Cd | 180<br>230<br>260<br>300 | 3,30<br>3,32<br>3,33<br>3,35 | 10<br>9,6<br>9,2<br>9,0 | 8,3<br>8,0<br>7,9<br>7,5 | 9,0<br>8,7<br>8,6<br>8,4 | [5] |
| Ga-Sn | 18<br>90<br>240 | 2,60<br>2,78<br>2,95 | 11,6<br>11,0<br>9,2 | 10,0<br>9,6<br>8,5 | 11,7<br>10,7<br>9,3 | [6] |
| In— Ga | 22<br>50<br>110 | | 8,6<br>8,0<br>7,4 | 11,0<br>10,0<br>9,2 | 7,4<br>6,7<br>6,6 | [6] |
| Bi—Cd | 152<br>180 | | 6,6<br>5,4 | 8,3<br>7,4 | | [7] |

**Табл.1**. Параметри ближнього порядку евтектик в рідкому стані

У табл.1 приведені результати дослідження деяких простих евтектичних сплавів в рідкому стані. З табл. 1 видно, що координаційні числа компонентів в сплаві і чистих компонентів майже не відрізняються один від одного, тобто підтверджується припущення про існування в рідких

евтектиках областей із структурою чистих компонентів. Проте гіпотеза про статистичний розподіл атомів різних сортів також є цілком прийнятною. Таким чином, виходячи з результатів рентгенографічного дослідження і вивчення фізичних властивостей, можна припустити, що при температурі плавлення більшість простих евтектик характеризуються областями із структурою чистих компонентів. Підвищення температури викликає порушення квазіевтектичної структури цих сплавів, тобто має місце поступове перемішування атомів різних сортів, що приводить до утворення однорідного фізичного розчину. Проте в деяких випадках (наприклад, в евтектиці галій-олово) найправдоподібніше, що вже при температурі плавлення атоми галію і олова розподілені статистично по відношенню до сорту. Це пояснюється, мабуть, незначним процентним вмістом другого компоненту в сплаві і слабкими силами зв'язку, що обумовлюють будову евтектик в твердому стані.

В деяких випадках ближній порядок в бінарних розплавах може характеризуватися поліструктурністю. Певний інтерес в цьому плані представляють розплави евтектик. Можна стверджувати, що в деяких досліджуваних системах поліструктурність чітко не проявляється, а реалізується мікронеоднорідний ближній порядок з тенденцією до об'єднання односортних атомів.

**Складні евтектики.** Складні евтектики в рідкому стані при температурі плавлення складається з областей із структурою компонентів евтектики, тобто, як і у разі простих евтектик. Вони характеризуються квазіевтектичною структурою. Підвищення температури приводить до порушення квазіевтектичності, і при високих температурах атоми різних сортів в розплавлених сплавах евтектичного складу розподілені статистично по відношенню до сорту.

Дослідження складних евтектик в рідкому стані за допомогою рентгенографічного методу свідчать про його великі можливості.

# *Розділ II.* Структура металічних розплавів

## *2.1. Ближній порядок рідкого Al та властивості Ni I Si*

Ближній порядок — впорядковане взаємне розташування частинок, атомів або молекул в речовині, яке (на відміну від дальнього порядку) повторюється лише на відстанях, порівнянних з відстанями між атомами, тобто ближній порядок є закономірність при розташуванні сусідніх атомів. Ближній порядок мають аморфні тіла і рідини. Ближнього порядку немає в газах.

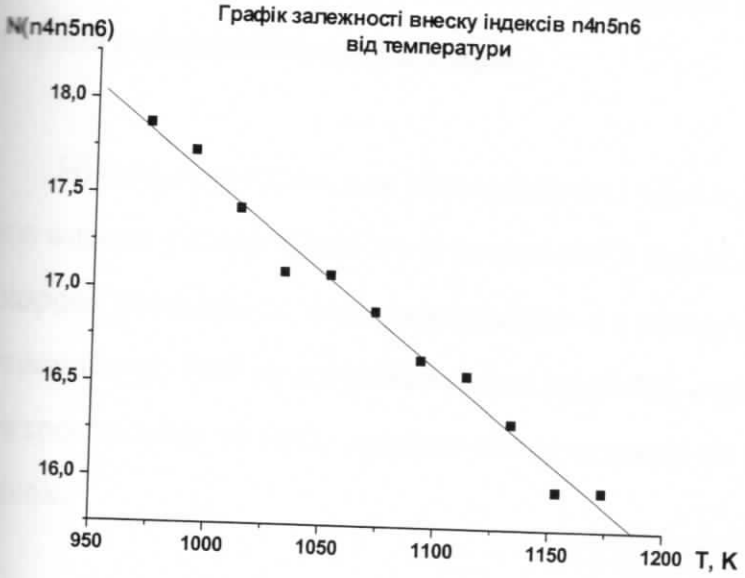
Сплави на основі алюмінію мають велике практичне значення, оскільки характеризуються легкістю, корозійною стійкістю і високою електропровідністю. Більшість квазікристалічних матеріалів, що мають унікальний спектр фізико-хімічних властивостей, отримують із розплавів алюмінію з перехідними металами. Таким чином, дослідження структурних та динамічних властивостей розплавів алюмінію та багатокомпонентних систем на його основі має значне фундаментальне та прикладне значення. Метою цієї роботи було дослідження структури рідкого алюмінію в широкому температурному інтервалі.

За допомогою методу класичної молекулярної динаміки (МД), було проведено моделювання структури рідкого Al при температурах у диапазоні 883 - 1173 К з інтервалом 20 К. Моделювання проводилося для NTV-ансамблей частинок, що містили 10648 атомів металу. Парний потенціал міжчастинкової взаємодії $U(R)$ розраховувався в рамках теорії псевдопотенціалу з використанням формфактору Ашкрофта[1]:

$$W(s) = -\left(\frac{4\pi Ze^2}{\Omega_0 s}\right)\cos(sR_c a_0),$$

де $a_0$ - радіус Бора; $R_c$ - радіус атомного остова, що для Al складає 0,57 Å, $\Omega_0$ - атомний об'єм.

Отримані структурні моделі аналізувалися статистично-геометричним методом Вороного-Делоне. Температурні залежності метричних та топологічних характеристик отриманих моделей мають лінійний характер, що спростовує гіпотезу про існування зміни локального оточення атомів, що проходить поблизу 1073 К [2].




Для перевірки коректності використання потенціалу проводилось порівняння розрахованих із МД-моделей та експериментальних значень коефіцієнта самодифузії. Отримані із моделі значення співпадають з експериментальними в межах відхилення 20-30 %, що є непоганим узгодженням.

***Нікель (Ni)***

Нікель завжди був життєво важливим матеріалом для широкого спектру галузей промисловості.

Нікель завжди був життєво важливим матеріалом для багатьох галузей промисловості з тієї простої причини, що це дуже універсальний матеріал, який можна сплавити з більшістю інших металів.

Нікелеві сплави стійкі до високого тиску і температури, що робить їх добре придатними для високоефективних застосувань, таких як лопаті реактивних двигунів. Вони також стійкі до корозії. Саме тому Монель( високоміцний корозійностійкий нікелевий сплав) використовується в глибокозаглиблених видобутку, де морська вода становить постійну загрозу корозії.

Нікель і нікелеві сплави - це кольорові метали з високою міцністю і в'язкістю, відмінною корозійною стійкістю і чудовими властивостями при підвищених температурах. Чистий нікель є яскравим сріблясто-білим металевим елементом групи заліза, він твердий, ковкий і пластичний. Чистий

нікель сам по собі є міцним і стійким до корозії і є чудовою основою для творення спеціалізованих сплавів.

Нікель підходить для різноманітних застосувань
Його висока універсальність у поєднанні з надзвичайною стійкістю до тепла та корозії привели до його використання в різноманітних сферах застосування; такі як авіаційні газові турбіни, парові турбіни на електростанціях та його широке використання на енергетичному та ядерному галузях.

***Кремній (Si)***

Кремній у твердому стані є напівпровідником, що має рихлу структуру, яка характеризується наявністю жорстких гомеополярних зв'язків і низьким координаційним числом, рівному 4. Його плавлення супроводжується скачкоподібною зміною ряду фізичних властивостей.

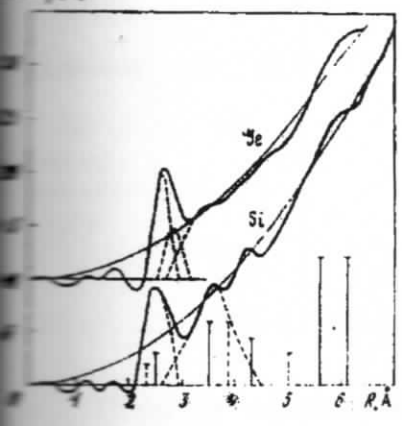



***Рис.3.3.*** Функція радіального розподілу атомів для Si (1430° C) і Ge (970° C). Вертикальні відрізки – положення координаційних сфер в кристалічному кремнії із структурою алмазу (пунктир) і простого куба (суцільна лінія)

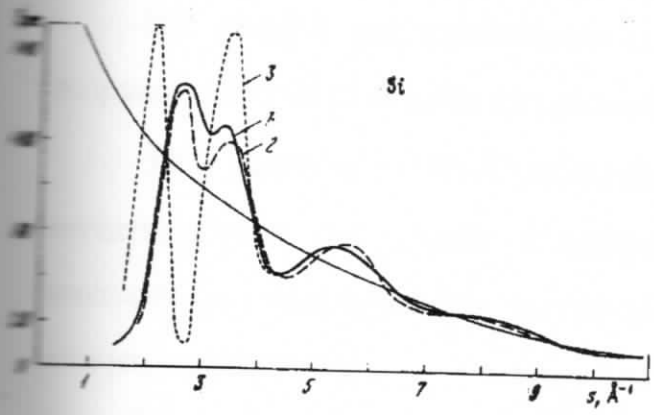



***Рис.3.4.*** Криві інтенсивності для рідко-го Si.1 – експеримент 1430° С;2, 3 – розрахунок для структури простого куба і алмаза відповідно.

Основні характеристики структури розплавленого Si отримані при аналізі кривих інтенсивності (рис.3.4) і функцій радіального розподілу атомів (рис.3.3) для різних температур, приведені в табл.3. Тут показані значення параметрів ближнього порядку для кристалічного стану.

**Таблиця 3.** Параметри ближнього порядку в кристалічному і рідкому кремнію.

| Елемент | T, °C | $S_1$, Å$^{-1}$ | $S_2$, Å$^{-1}$ | ΔS, Å$^{-1}$ | $R_1$, Å | $R_2$, Å | ΔR, Å | $z_1$ | $z'_1$ | $z_2$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Si (кристал) | 900 [110] | 2,01 | 3,28 | | 2,36 | 3,84 | | | 4 | 12 |
| Si (структура простого куба) | 900 | | | | 2,50 | 3,54 | | | 6 | 12 |
| | 1430 | 2,75 | 3,40 | 0,50 | 2,50 | 3,55 | 0,50 | 5,1 | 6,3 | 8,6 |
| | 1520 | 2,90 | 3,40 | | 2,50 | 3,55 | 0,51 | 5,0 | 6,1 | |
| | 1650 | | 3,30 | | 2,50 | 3,60 | 0,53 | 4,6 | 5,8 | |

Перший максимум на кривій інтенсивності для кремнію при 1430° С розділяється на два піка, положення котрих не відповідає інтерференційним лініям кристалічного кремнію з граткою алмазу. При плавленні кремнію спостерігається перехід до більш щільнішої упаковки атомів. Координаційне число (повна площа під першим максимумом ФРР) зростає до 6,3, а найкоротша міжатомна відстань збільшується на 0,14 Å. Остання величина погоджується з ростом радіуса при зміні координації атомів від 4 до 6. Максимуми на ФРР розміщені на відстанях, що спостерігаються в структурі простого куба (рис.3.3).

На рис.3.4 експериментальна крива інтенсивності співставлень з розрахованою по рівнянню для розмитих граток алмазу і елементарного куба.

При цьому $\overline{u_1^2}$ =0,05 Å$^2$ визначали по формулі. Найкраще погодження з експериментом яке згідно з положенням, так і по величині чотирьох максимумів і мінімумів має інтерференційна крива, розрахована для моделі елементарного куба.

Перегрів рідкого кремнію на 250 – 350° С вище точок плавлення практично не змінює величину $R_1$ (табл. 3). Це свідчить про те, що головна перебудова структури, пов'язана з розрушення направлених ковалентних зв'язків і їх «металізацією», відбувається при температурах плавлення.

При рентгенографії рідкого кремнію вид дифракційних кривих залежить від способу теплової обробки розплаву. На рис. 3.4 приведені дві рентгенограми (криві 1 і 6), отримані при 1430° С. Перша зазнята при розплаві кремнію і має чітко роздвоєний головний максимум. Крива інтенсивності 6 записана на електронному потенціометрі після охолодження розплаву від 1650° С. Головний максимум на ній не розділяється. Явище гістерезисну структури, аналогічне гістерезисну електроопору рідких силіцидів нікеля, спостерігалось неодноразово і, по очевидному, пов'язане з повільним встановленням рівновагомого ближнього порядку при охолодженні розплаву. Повторний нагрів зразку без кристалізації давав таку ж дифракційну картину, як і при охолодженні кремнію. При кристалізації рідини і подальшому розплаві всякий раз отримували рентгенограми, що відповідають кривій 1.

### *2.2. Вплив домішок на структуру алюмінієвих розплавів.*

Включення домішок в алюмінієві сплави може мати великий вплив на властивості матеріалу. В алюмінії двома найпомітнішими типами домішок є оксидні плівки (глинозем або шпінелі) та інтерметалічні частинки. Оксиди, що затримуються в алюмінії, діють як підйомники напружень і спричиняють різке зниження межі міцності матеріалу на розтяг, плинність і втому.

Загальний результат – передчасний вихід з ладу алюмінієвого компонента. Наявність оксидів також знижує корозійну стійкість чистого алюмінію. Крім того, було показано, що наявність як захопленого глинозему, так і поверхневих плівок негативно впливає на оброблюваність через збільшення зносу інструменту. Герметичність під тиском, яка є важливим параметром лиття під тиском, і обробка поверхні також зменшуються, коли в алюмінієвому розплаві присутні оксидні домішки. Більшість інтерметалічних включень знижують корозійну стійкість алюмінію. Інтерметаліди, що містять нікель і залізо, мають найбільший вплив на корозійну стійкість алюмінію через велику різницю в потенціалі розчину між цими фазами та алюмінієвою матрицею. Це викликає утворення мікрогальванічних елементів на поверхні алюмінію. Однак загальний вплив інтерметалідів на корозійну стійкість алюмінію менший, ніж у інших реакційноздатних металів, таких як магній, через природний захисний оксидний шар, який утворюється на поверхні алюмінію. Загалом, утворення інтерметалевих фаз в алюмінієвій матриці має зміцнюючий ефект за рахунок або дислокації, або закріплення зерен. Лише інтерметаліди марганцю, хрому та цирконію мають позитивний відновлювальний вплив на розмір зерна. Однак збільшення міцності скомпрометується втратою пластичності, що вимагає вибору складу, який максимізує міцність і подовження алюмінію. Інші домішки, що впливають на властивості матеріалу алюмінію, - це силікат магнію, карбід алюмінію та хлоридні включення. Силікати магнію та карбіди алюмінію підвищують механічну міцність алюмінію, тоді як хлоридні включення створюють пористість і викликають передчасне механічне пошкодження. Включення карбіду алюмінію також знижують корозійну стійкість.

### *2.4. Обробка експериментальних даних.*

### *2.4.1. Внесення поправок на поляризацію і поглинання.*

Рентгенівське випромінювання при розсіянні речовиною частково поляризується, внаслідок чого послаблюється його інтенсивність. Разом з тим, необхідно знайти інтенсивність, яка спостерігалась би при відсутності поляризації.

Якщо крива інтенсивності одержана в фільтрованому випромінюванні, то поправка на поляризацію розраховується за формулою

$$P(\Theta) = \frac{1 + \cos^2 2\Theta}{2}, \qquad (2.2)$$

де $2\Theta$ – кут розсіяння.

Якщо ж первинний потік рентгенівського випромінювання монохроматизується внаслідок відбивання від монокристалу, то формула для обчислення поправки на поляризацію має вигляд

$$P(\Theta) = \frac{1 + \cos^2 2\Theta \cos^2 2\varphi}{2}, \qquad (2.3)$$

де $\varphi$ – кут відбивання від відповідної площини монокристалу.

При взаємодії рентгенівського випромінювання з речовиною частина його енергії перетворюється в різні види внутрішньої енергії речовини і в енергію вторинного випромінювання. Наслідком цього є часткове поглинання падаючого на зразок випромінювання. Тому інтенсивність розсіяння не може бути правильно визначена без внесення поправки на поглинання. Ця поправка залежить від форми зразка і кута розсіяння. У випадку плоского зразка при зйомці на проходження променів ця поправка обчислюється за формулою

$$A = \frac{1}{\mu l x}\left(1 - e^{-\mu l x}\right) \qquad (2.4)$$

де l – товщина зразка, $\mu$ – лінійний коефіцієнт поглинання; $x = \frac{1 - \cos^{2\Theta}}{\cos(2\Theta)}$.

При зйомці на відбивання від плоскої поверхні зразка поправка на поглинання задається формулою

$$A = \frac{1}{2\mu}\frac{\sin(2\Theta - \alpha)}{\sin\alpha + \sin(2\Theta - \alpha)}, \qquad (2.5)$$

де $\alpha$ – кут, під яким випромінювання падає на поверхню рідини.

Якщо під час зйомки на $\Theta$ – $\Theta$ дифрактометрі зберігається сталість кутів ($\alpha=\Theta$), то з (2.4) випливає, що А не залежить від кута розсіяння $\left(A = \frac{1}{4\mu}\right)$.

У випадку циліндричного зразка поправка на поглинання може бути розрахована за формулою

$$A(\Theta) = \sum_n \frac{a_n(\Theta)}{(\mu R_0)^n}, \qquad (2.6)$$

де $R_0$ – радіус зразка; $a_n$ – коефіцієнт, який залежить від кута розсіяння.

Внесення вказаних поправок відбувається шляхом ділення експериментальних значень інтенсивності на добуток факторів поляризації і поглинання.

### *2.4.2. Нормування кривих інтенсивності.*

В рівняннях для інтенсивності розсіяння величини I(S) і $F^2(S)$ виражені в електронних одиницях. З експерименту ми отримуємо інтенсивність у відносних одиницях. Тому необхідно нормувати експериментальні значення інтенсивності, тобто приводити їх до електронних одиниць:

$$I_{нор}(S)=kI_{відн}(S). \qquad (2.7)$$

Нормуючий множник k може бути знайдений декількома способами. Один з них ґрунтується на тому, що при великих кутах розсіяння крива інтенсивності перестає осцилювати відносно кривої незалежного розсіяння. Це випливає , зокрема, з рівняння

$$I(S) = NF^2(S)\left\{1 + \int_0^\infty 4\pi R^2[\rho(R) - \rho_{am}]\frac{\sin SR}{SR}dR\right\}. \qquad (2.8)$$

При $S \to \infty$ функція $\frac{\sin SR}{SR} \to 0$, а $I(S) \to NF^2(S)$. Тому для тих значень S, при яких міжатомні інтерференційні ефекти виражені дуже слабо, експериментальну криву інтенсивності, виправлену на поляризацію і поглинання, можна сумістити з кривою незалежного розсіяння, розрахованою з табличних даних.

Оскільки виміряна інтенсивність складається з когерентної і некогерентної частин, нормуючий множник потрібно обчислювати за формулами:

$$k = \frac{F_K^2(S) + I_{нк}(S)}{I_{екс}(S)} \qquad (2.9)$$

– для атомарних рідин,

$$k = \frac{\sum F_i^2(S) + \sum I_i^{нк}(S)}{I_{екс}(S)} \qquad (2.10)$$

для молекулярних рідин.

Якщо всі експериментальні значення інтенсивності помножити на нормуючий множник, то ми одержимо криву розсіяння в електронних одиницях.

Інший спосіб нормування експериментальних кривих розсіяння ґрунтується на законі збереження інтенсивності, який можна сформулювати так: інтенсивність розсіяння не залежить від того, як розміщені атоми один відносно одного. Інтерференція між хвилями, розсіяними даною кількістю атомів, приводить лише до перерозподілу інтенсивності, підсилення в одних напрямках і послаблення в інших, не змінюючи сумарної її величини. Тому, якщо нормовані експериментальні значення інтенсивності проінтегрувати по всіх S, то цей інтеграл буде дорівнювати інтегралу по значеннях інтенсивності, що дають ізольовані атоми:

$$k\int_0^\infty I_{екс}(S)4\pi S^2 dS = \int_0^\infty F^2(S)4\pi S^2 dS \qquad (2.11)$$

Експериментальна інтенсивність складається з когерентної і некогерентної частин. Тому рівність (2.11) потрібно переписати у вигляді

$$k\int_0^\infty S2I_{екс}(S)dS = \int_0^\infty S^2\left[F_K^2(S) + I_{нк}(S)\right]dS \qquad (2.12)$$

$$k = \frac{\int_0^\infty S^2\left[F_K^2(S) + I_{нк}(S)\right]dS}{\int_0^\infty S2I_{екс}(S)dS} \qquad (2.13)$$

Згідно цієї формули, нормуючий множник визначається як відношення площі під кривою сумарного незалежного розсіяння до площі під експериментальною кривою розсіяння. Критерієм точності нормування може бути рівність

$$\int_0^\infty S^2\left[a(S)-1\right]dS = -2\pi^2\rho_{at} \qquad (2.14)$$

яке отримується з рівняння

$$4\pi\rho(R) = 2\pi l\rho_{at} + \frac{2}{\pi}\int_0^\infty S^2\left[a(S)-1\right]\frac{\sin SR}{SR}dS \qquad (2.15)$$

При умові, що для значення R=0 функція $\rho(R)=0$, а $\frac{\sin SR}{SR}=1$.

Середню атомну густину обчислюють за формулою

$$\rho_{at} = \frac{\rho N_A}{10^{24}A} \qquad (2.16)$$

де A – атомна маса, $\rho$ – густина речовини, $N_A$ – стала авогадро.

Рівність (2.14) можна переписати ще в такому вигляді

$$\int_0^\infty S^2 k a_{екс}(S)dS - \int_0^\infty S^2 dS = -2\pi^2\rho_{at} \qquad (2.17)$$

Оскільки k – величина стала, то її можна винести за знак інтеграла і в такому разі отримаємо вираз

$$k = \frac{\int_0^{\infty} S^2 dS - 2\pi^2 \rho_{at}}{\int S^2 a_{екс}(S) dS} \qquad (2.18)$$

В цьому випадку для нормування нам потрібно мати лише експериментальну криву інтенсивності та середню атомну густину.

Необхідно відзначити, що при дослідженнях криву інтенсивності I(S) можна визначити в обмеженому інтервалі S, а не від 0 до ∞, як цього вимагає теорія. Пояснюється це двома причинами: 1) при зйомці на проходження розсіяні під невеликими кутами промені перекриваються первинним пучком, а при зйомці на відбивання - краями зразка. Через це не можна визначити хід інтенсивності від 0 до деякого значення $S_1$ Тому доводиться довільно екстраполювати I(S) до нуля; 2) в результаті скінченності довжини хвилі крива I(S) може бути визначена до значень $S_2 < (4\pi/\lambda)\sin\Theta$ . Якщо λ=1,54 Å, то максимальне значення $S_2 = 4\pi/\lambda = 8.1\overset{0}{A}^{-1}$ і $S_2 = 18\overset{0}{A}^{-1}$ при $\lambda = 0.71\overset{0}{A}$.

Експериментально вдається виявити осциляції I(S) до значень $S_2 = 10-12\overset{0}{A}^{-1}$ в залежності від чутливості методу і довжини хвилі використовуваного випромінювання.

*Розділ IV.* **Експериментальна частина**

## *4.1. Ближній порядок рідкої евтектики $Cu_{0.70}Si_{0.30}$.*

Експериментальний структурний фактор для розплавленої евтектики Cu-Si (70 ат% Cu) представлено на рис 4.1. На цьому ж рисунку для порівняння наведені структурні фактори рідких міді і кремнію.

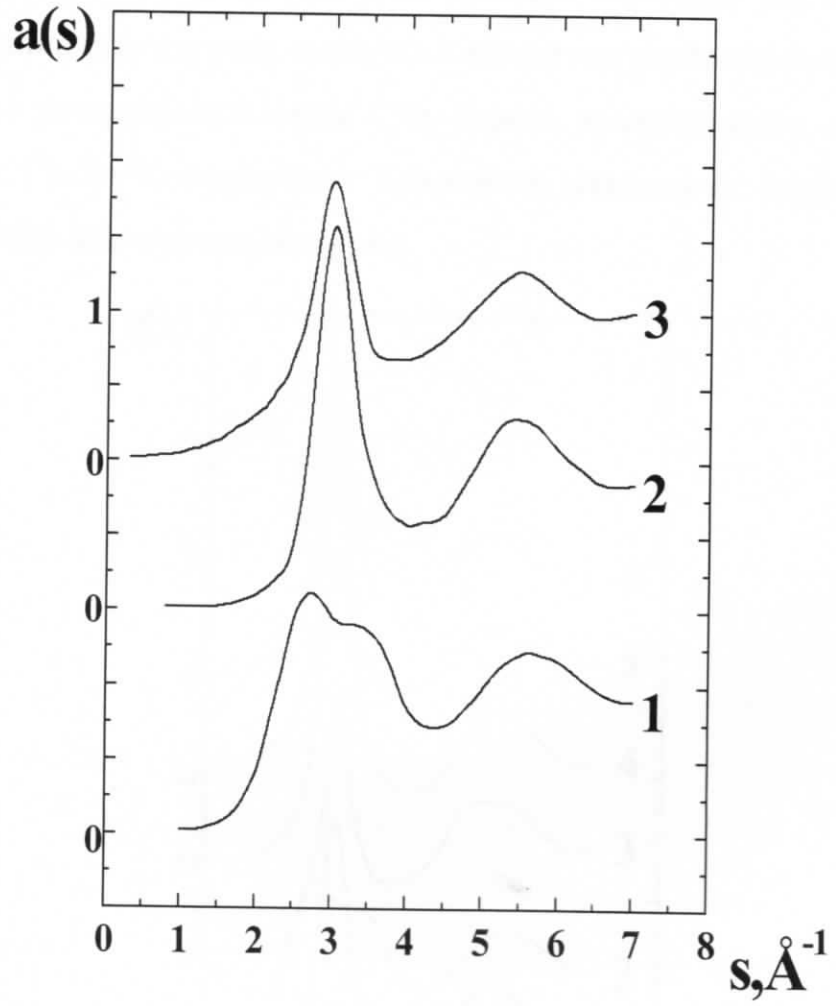



***Рис. 4.1.*** Структурні фактори розплавленої евтектики $Cu_{0.70}Si_{0.30}$ (3) і рідких Cu (2) і Si(1)

Для цієї евтектики СФ не проявляє рис характерних для кремнію, а більше відтворює особливості структурного фактора розплавленої міді. Для встановлення типу мікрообластей структури ближнього порядку нами розраховувались модельні структурні фактори, які передбачали, що дифракція рентгенівських променів відбувається на структурних одиницях

двох типів. Розсіянням, яке формується внаслідок дифракції на мікрообластях різного типу ми нехтували. У випадку евтектичного розплаву Cu-Si, виходячи з аналізу експериментальних СФ, передбачається існування мікрообластей на основі міді та кремнію в одному випадку та кремнію і хімічно впорядкованих атомних угрупувань типу $Cu_3Si$ в другому. СФ розраховані для моделей, що відповідають вказаному типу мікрообластей показані на рис.4.2. Видно, що для обидвох моделей, які передбачають існування різних структурних одиниць в атомному розподілі існує задовільне узгодження з експериментальним СФ. Однак, в модельному структурному факторі для $Cu_3Si$+Si положення основного максимуму дещо зсунуте до менших значень хвильового вектора s.

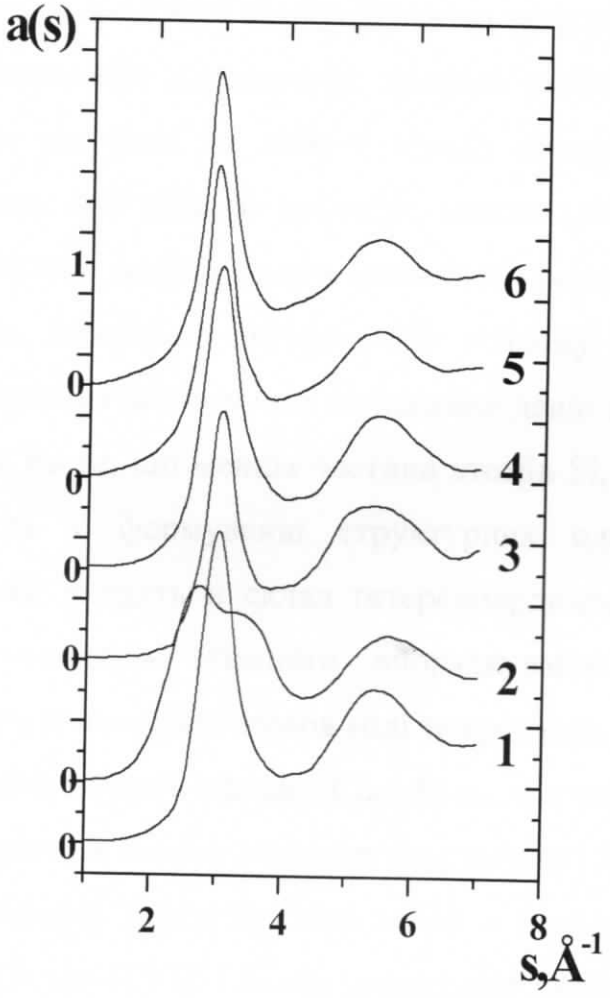



***Рис.4.2.*** 1,2,3- структурні фактори міді, кремнію і евтектики Cu-Si; 4,5- СФ розраховані згідно моделей Cu+Si і Si+$Cu_3Si$ відповідно; 6- СФ розплаву $Cu_3Si$

Це вказує на те, що вплив кремнію на модельний СФ є дещо більшим ніж це має місце в розплаві. Разом з тим також є мало імовірно, що модель евтектики на основі структурних одиниць Cu-Cu і Si-Si можна прийняти для опису структури евтектики оскільки для цієї моделі висота першого максимуму СФ є більшою за експериментальне значення. Враховуючи те, що цей параметр пов'язаний з щільністю атомного розподілу, можна стверджувати, що реальна щільність атомного пакування є трохи меншою ніж передбачає модель. Таке зменшення цього параметра можна пояснити існуванням мікронеоднорідної будови, структурні одиниці якої можуть мати такі розміри, щоб характеризувати їх як кластери.

Враховуючи профіль СФ рідкої сполуки $Cu_3Si$, можна припустити, що ця сполука також є в значній мірі відповідальною за формування ближнього порядку у рідкій евтектиці. Аналізуючи профіль експериментального СФ евтектики, особливо напливи на лівій і правій вітках, які відповідають основним максимумам СФ рідкого кремнію, можна зробити висновок, що деяка незначна частина атомів цього елемента формує мікрообласті з власною структурою. Модельне значення СФ у цьому випадку не погано узгоджується з експериментальним, але положення дещо зміщене до менших значень s. Це вказує на те, що менша частина атомів Si, ніж це передбачає модель, бере участь у формуванні структурних одиниць з власною структурою. Ці атоми входять в склад гетерокоординованих структурних одиниць в яких топологія атомного впорядкування в значній мірі визначається хімічною взаємодією атомів міді та кремнію.

Для рідкого евтектичного сплаву $Cu_{0.70}Si_{0.30}$ при різних температурах спостерігається зменшення висоти першого максимуму і його зсув в область малих хвильових векторів (рис.4.3). Такі зміни є незначними коли сплав нагрівається від 1100К до 1150К і більш значні при подальшому нагріванні до 1250К.

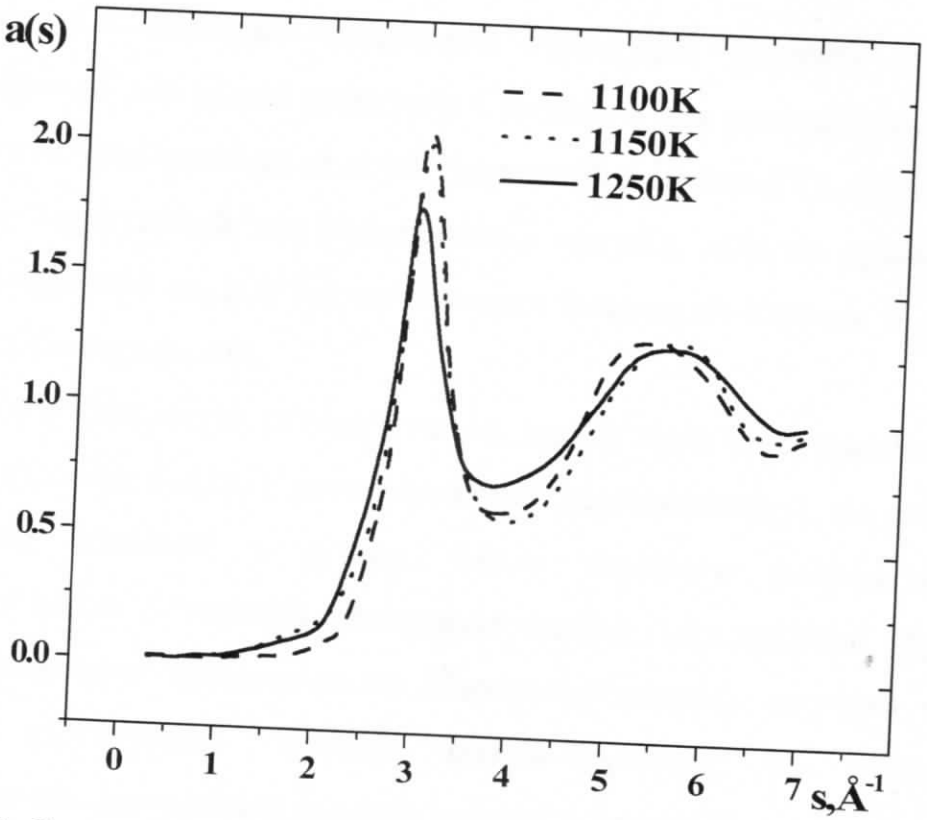



***Рис. 4.3.*** Структурні фактори рідкого евтектичного сплаву $Cu_{0.70}Si_{0.30}$ при різних температурах.

Цей факт є підтвердженням того, що хімічне впорядкування в евтектичному розплаві $Cu_{0.70}Si_{0.30}$ підвищує термічну стабільність структури в певному температурному інтервалі.

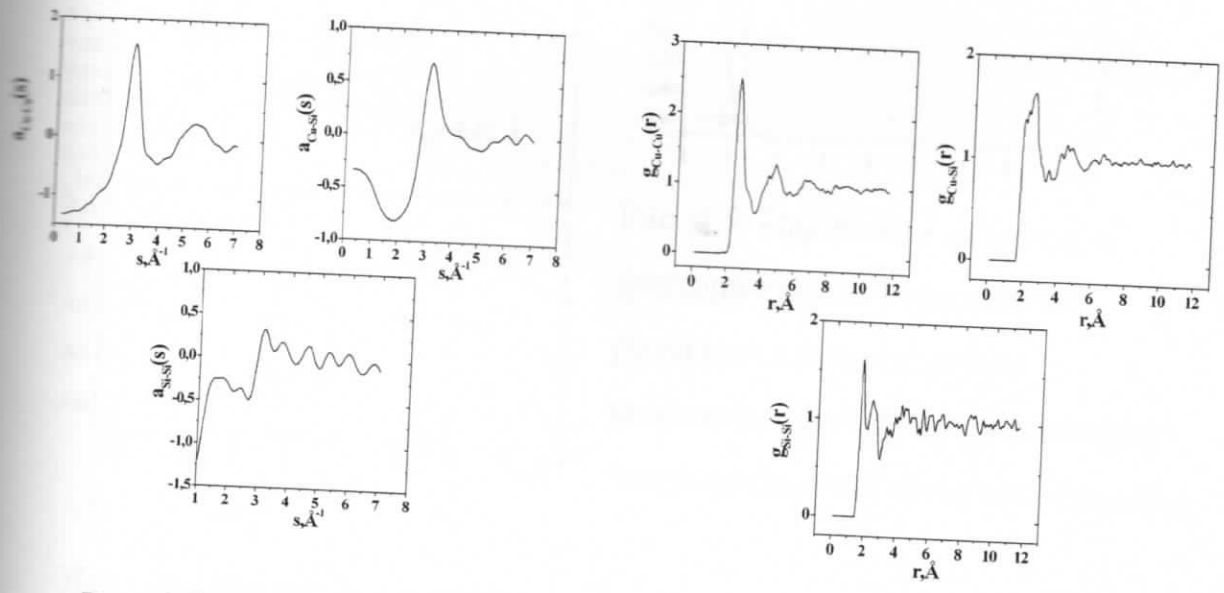



Рис. 4.4. Парціальні структурні фактори та парні кореляційні функції для розплавленої евтектики $Cu_{0,7}Si_{0,3}$

На рис. 4.4 показано парціальні структурні фактори та парні кореляційні функції для рідкої евтектики $Cu_{0,7}Si_{0,3}$. З цих рисунків видно, що парціальні структурні фактори та парні кореляційні функції Cu-Cu та Cu-Si мають вигляд характерний для розплавлених металів, хоча на правій вітці структурного фактора $a_{Cu\text{-}Si}(s)$ спостерігається невеликий наплив, а другий максимум є слабо виражений.

Також потрібно звернути увагу на те, що на лівій вітці парціального структурного фактора $a_{Si\text{-}Si}(s)$ є явно виражений передмаксимум, що свідчить про існування областей з різним типом атомного впорядкування. Асиметричним також є перший максимум парної кореляційної функції $g_{Si\text{-}Si}(r)$. Про існування неоднорідного ближнього порядку свідчать також парціальний структурний фактор Бхатіа–Торнтона та радіальна концентраційно-концентраційна функція розподілу (рис. 4.5).

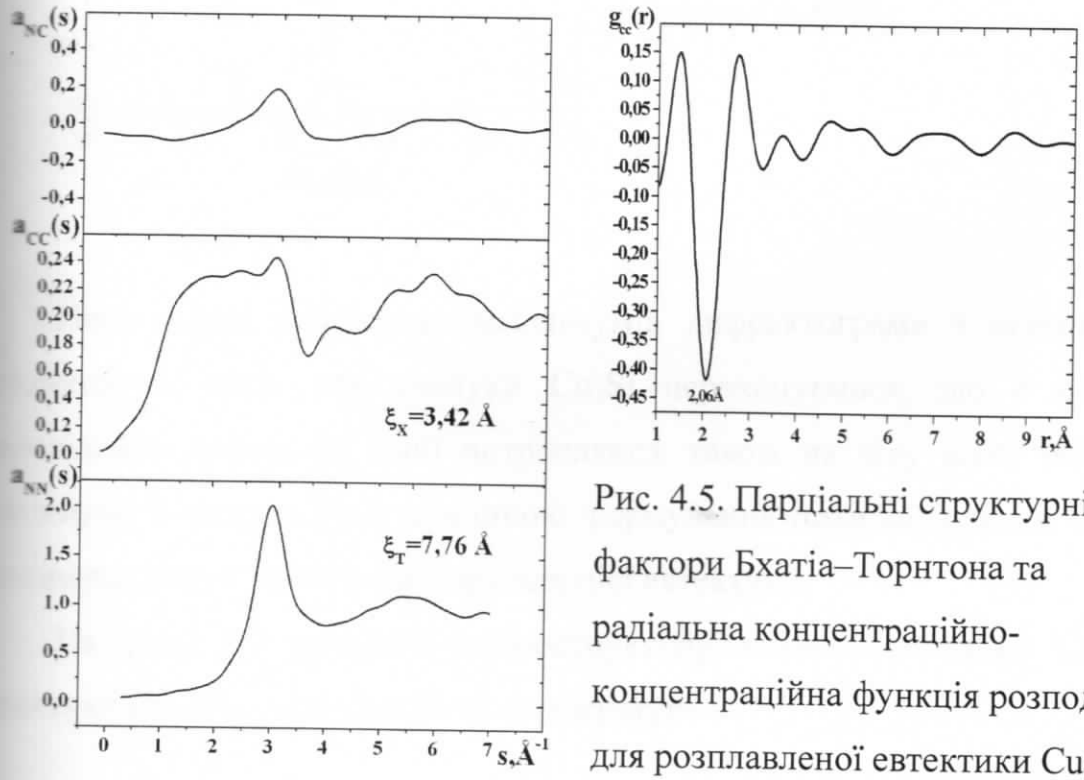



Рис. 4.5. Парціальні структурні фактори Бхатіа–Торнтона та радіальна концентраційно-концентраційна функція розподілу для розплавленої евтектики $Cu_{0,7}Si_{0,3}$

Для порівняння структур в рідкому і твердому станах, ми одержали дифрактограму для кристалічної евтектики при температурі дещо нижчій від температури кристалізації. Її вигляд показано на рис. 4.6.

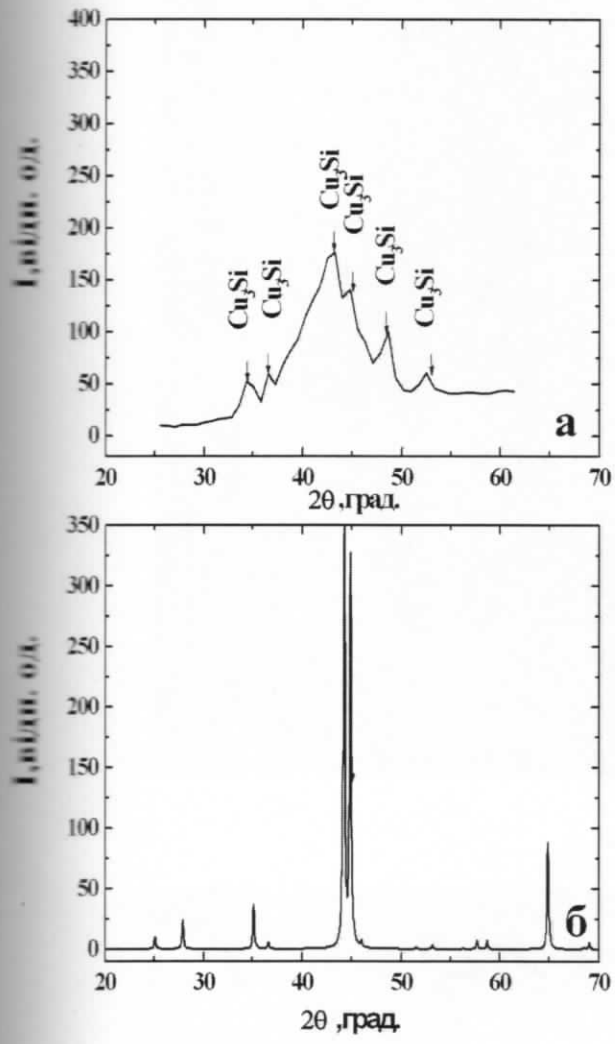
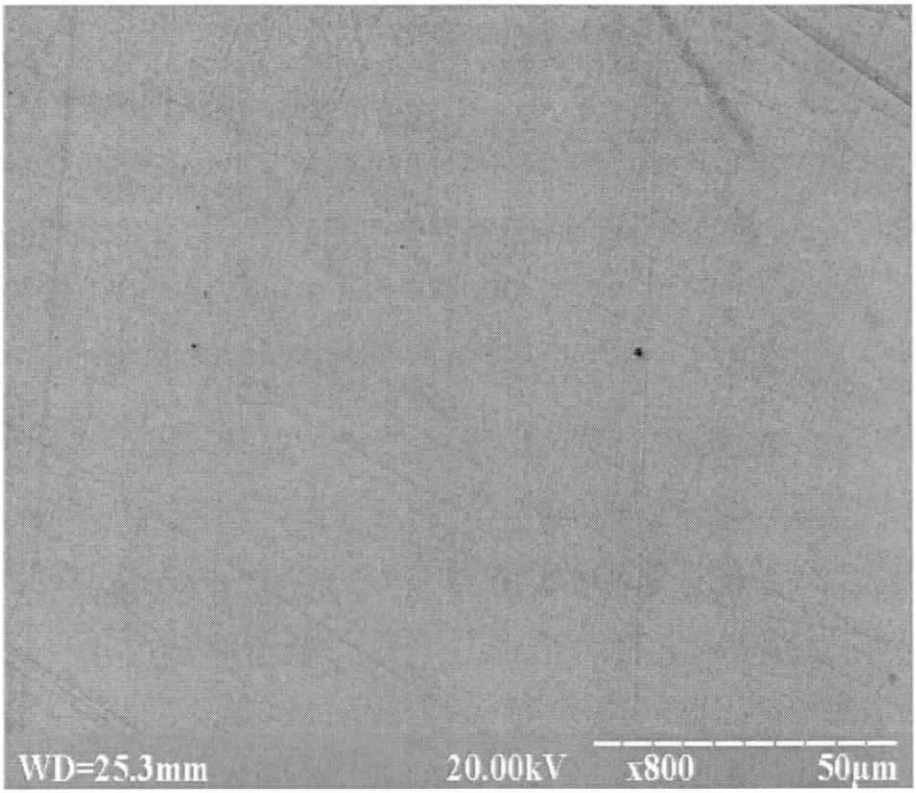


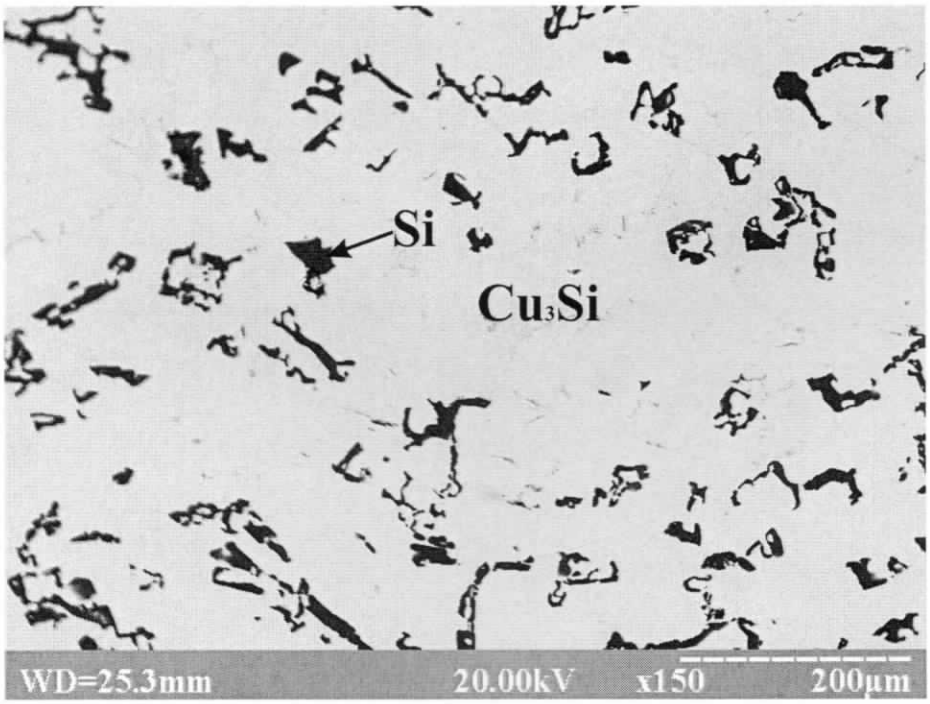

Рис. 4.6. Експериментальна дифрактограма евтектики при температурі $T_{лікв}$-5К (а) та дифрактограма для кристалічної високотемпературної модифікації сполуки $Cu_3Si$ (б)

Порівнявши положення максимумів дифрактограми з відповідними положеннями піків для сполуки $Cu_3Si$ переконуємося, що є піки, які відповідають η-фазі. Ці лінії потрапляють також на ліву вітку основного максимуму і можуть бути причиною формування похилої ділянки першого максимуму структурного фактору для цієї евтектики.

На рис. 4.7 показано мікроструктуру хімічної сполуки $Cu_3Si$ та евтектики $Cu_{0,7}Si_{0,3}$ при кімнатній температурі.




а




б

Рис.4.7. Мікроструктура хімічної сполуки $Cu_3Si$ (*а*) та евтектики $Cu_{0,7}Si_{0,3}$ (*б*) при кімнатній температурі.

Як бачимо з рисунків, досліджувана евтектика складається зі сполуки $Cu_3Si$ та чистого кремнію.

Отже, із зазначеного можна зробити висновок про те, що евтектика $Cu_{0,7}Si_{0,3}$ характеризується мікронеоднорідною будовою. Структуру цієї евтектики можна представити як матрицю, яка є розчином міді й кремнію в якій існують хімічно впорядковані мікрообласті зі структурою яка відповідає структурі сполуки $Cu_3Si$

## Висновки

1. Структуру розплавленої евтектики $Cu_{0.70}Si_{0.30}$ можна представити як матрицю на основі атомів міді та кремнію в якій статистично розподілені хімічно впорядковані структурні одиниці з кристалічною структурою η-фази.

2. Проаналізувавши зміни профілю структурного фактора рідкої евтектики $Cu_{0.70}Si_{0.30}$ при різних температурах, встановлено, що підвищення температури на 50К вище температури плавлення супроводжується меншими структурними змінами порівняно зі зміною структури при вищих температурах. Такі структурні перетворення можна пояснити існуванням в рідкому стані, при температурах близьких до температури плавлення, мікрообластей з хімічним ближнім порядком $Cu_3Si$, які стабілізують структуру розплаву в невеликому температурному інтервалі.

3. Існування мікронеоднорідного ближнього порядку підтверджують парціальні структурні фактори Бхатіа-Торнтона, а на переважаючу взаємодію різносортних атомів вказує парціальна парна кореляційна функція $g_{CC}(r)$. Зокрема, використовуючи згадані функції, встановлено, що розмір областей топологічного та хімічного впорядкування в розплавленій евтектиці $Cu_{0.70}Si_{0.30}$ відповідно становлять 7,76 Å, 3,42 Å, а відстані між різносортними атомами в мікрообластях з хімічним ближнім порядком – 2,06 Å.

## Список використаної літератури


1. Скрышевский А.Ф. Структурный анализ жидкостей. М., "Высшая школа", 1971.

2. Лашко О.С. Про структуру рідкого стану. – ДАН УРСР, 1957, №1, с. 30.

3. Лашко А.С. Рентгенографическое исследование структуры жидкого сплава олово-цинк. – "Вопросы физики металлов и металловедения", 1957, №8, с. 182.

4. Скрышевский А.Ф. Структурный анализ жидкостей. М., "Высшая школа", 1971.

5. Дутчак Я.И., Бондарь Н.М. О характере упорядочения атомов в системе кадмий-олово. – УФЖ, 1959, т. 4, №3, с. 402.

6. Дутчак Я.И., Клым Н.М. О характере распределения атомов в сложных расплавленных эвтектических сплавах. – ФММ, 1965, т. 19, №1, с. 137.

7. Дутчак Я.И., Прохоренко В.Я., Клым Н.М. Структура и термоэлектрические свойства системы висмут-кадмий в твердом и жидком состояниях. – ФТТ, 1965, №7, с. 1974.

8. S.P. Nikanorova,., M.P. Volkova, V.N. Gurina, Yu.A. Burenkova, L.I. Derkachenkoa,B.K. Kardasheva, L.L. Regelb, W.R. Wilcoxb Materials Science and Engineering A 390 (2005) 63–69.

9. S. S. Cho, B. S. Chun, c. W. Won, S. D. Kim, B. S. Lee, H. Baek C. Suryanarayana Journal of Materials Science 34 (1999) 4311 – 4320

10. А.Ф. Скрышевский Структурный анализ жидкостей и аморфных тел, М., Высшая школа, 1980, 328 с.

11. Д. Р. Вилсон Структура жидких металлов и сплавов, М., Металлургия 1972, 181 с.

12. Bernal J.D. Nature, 1960, 185,68.

13. Фишер И.З. Статистическая теория жидкостей. М., Физматгиз, 1961, 192 с.

14. Вертман А.А., Самарин А.М. Свойства расплавов железа. М., Наука, 1969, 280 с.

15.Архаров В.И., Новохатский И.А. ДАН СССР, 1969, т.185, №5, с. 1069-1071.

16.Н.А. Ватолин, В.А. Полухин Структура ближнего порядка в металлических расплавах // Труды IX российской конференции «строение и свойства металлических и шлаковых расплавов» т.1 Екатеринбург, 2004.

17.Ершов Г.С., Бычков Ю.Б. Физико-химические основы рационального легирования сталей и сплавов. М., Металлургия, 1982. 386 с.

18.Ершов Г.С., Позняк Л.А. Микронеоднородность металлов и сплавов. М., Металлургия, 1985, 212 с.

19.Ершов Г.С., Бычков Ю.Б. Высокопрочные алюминиевые сплавы. М., Металлургия. 1979. 192 с.

Додаток

# Безпека життєдіяльності та охорона праці

## Вступ

Основним завданням безпеки життєдіяльності є здійснення заходів технічного, санітарно-гігієнічного, правового і організаційного порядку, спрямованих на створення безпечних умов праці.

Важливе значення має безпека життєдіяльності в науково-дослідних установах, де працівники і студенти працюють з токсичними і радіоактивними речовинами, із складною високовольтною апаратурою, джерелами рентгенівського випромінювання.

## *1. Аналіз стану виробничих умов.*

### *1.1 Характеристика лабораторії*

Дипломна робота виконувалася у лабораторії рентгенографії рідин кафедри фізики металів фізичного факультету ЛНУ ім.. І. Франка. Лабораторія рентгенографії рідин розміщена на другому поверсі в сухому приміщенні, забезпечена природнім та штучним освітленням, температура в приміщенні підтримується в межах 18-20° у теплу пору року. Загальна площа у лабораторії становить 68 м$^2$, об'єм - 252 м$^3$. Площа на одне робоче місце - 17,0 м$^2$, об'єм 63м$^3$. Підлога у лабораторії дерев'яна. У лабораторії підтримується вологість приблизно 50 - 60 %, швидкість руху повітря 0,5 м/с. У лабораторії рентгенографії рідин знаходяться установки, що є джерелами рентгенівського випромінювання (установки типу ІРИС -3, ДРОН - 3).

### *1.2. Аналіз методів вимірювання і характеристика обладнання*

Експериментальна частина роботи виконувалась на рентгенівському дифрактометрі на базі рентгенівської установки ІРИС - 3. Дана установка є джерелом рентгенівського випромінювання. Напруга до 50 кВ, сила струму 20 мА. Відкачування вакууму в рідинному дифрактометрі проводилось форвакуумним насосом ВН - 461. Живлення рентгенівської трубки забезпечується високовольтною установкою.

### *1.3. Робота з іонізуючим випромінюванням*

Рентгенівські промені мають значний фізіологічний вплив на живі організми. Серед фотохімічних реакцій, викликаних ними, є такі, що суттєво змінюють їх стан. До них належать, наприклад, розщеплення молекул води на водень і гідроксильну групу, які хімічно дуже активні і негативно впливають на біологічні процеси.

## *2. Організаційно - технічні засоби*

### *2.1. Організація робочого місця і роботи*

Для роботи на рентгенівських апаратах допускаються особи, віком від 18 років, які мають форму допуску по експлуатації апаратів напругою вище 1000В. Під час роботи на рентгенівських апаратах використовують технічні засоби захисту і екранування, за допомогою яких можна знизити опромінення на робочому місці. Двері в лабораторії рентгенографії рідин оббиті листом свинцю, товщиною 1 мм.

### *2.2. Санітарно - гігієнічні вимоги до умов праці*

Рентгенівські промені можуть викликати місцеве ураження, наприклад, опіки, які дуже важко виліковуються, променеву хворобу - запальне ураження організму, пов'язане зі зміною складу крові.

У лабораторії рентгенографії рідин основними джерелами шкідливого для працівників рентгенівського випромінювання є:

a) відкриті вікна рентгенівських трубок;

b) пучки променів, які виходять з коліматорів рентгенівських камер;

c) випромінювання трубок при недостатньому поглинанні їх кожуха.

Ураження рентгенівськими променями виникає лише тоді, коли їхня дія перевищує допустимі рівні. Ступінь радіаційної небезпеки при роботі з джерелами рентгенівського випромінювання визначається величиною експозиційної дози, енергією випромінювання і характером опромінення працюючих (загальне, локальне).

### *2.3. Заходи безпеки при роботі з обладнанням*

При роботі використовували рентгенівську трубку типу БСВ -28, яка дає випромінювання у вигляді вузьких пучків. Трубка знаходиться в спеціальному захисному кожусі. При візуальному просвічуванні і юстуванні дифрактометра для аналізу потрібно одягти окуляри із свинцевого скла, рукавиці і фартух із гуми з високим вмістом свинцю. Захисні пристосування повинні забезпечити захист від прямого і розсіяного випромінювання.

Необхідний захист повинен бути забезпечений як самою будовою захисних пристроїв, так і раціональним розташуванням частин рентгенівських апаратів.

Враховуючи, що пари свинцю токсичні, все повинно бути пофарбовано олійною фарбою. Також для захисту від рентгенівських променів використовують прозорі екрани із кришталевого скла, в якому великий вміст свинцю.

З метою гарантування безпеки при роботі на рентгенівських апаратах потужність дози рентгенівського випромінювання у будь - якій точці на відстані 5 - 10 см. від поверхні захисту (кожуха) не повинне перевищувати 0,05мкР/с.

Захист у в усіх лабораторіях необхідно систематично перевіряти за допомогою дозиметрів.

### *2.4. Захист від дії електричного струму*

При роботі на високовольтній установці, внаслідок необережності працюючого, ушкодження апаратури, можливе ураження струмом. Струм 100мА викликає смерть при дії його на людину більше 3 секунд. Негативний вплив на людину має і високочастотне електромагнітне поле, яке утворюється в електроустановках. Для захисту від нього використовують екранування робочої зони оператора.

Усі рентгенівські установки, пульти, робочі столи і щити надійно заземлені. Систематично перевіряється стан механічних контактів заземлення. Високовольтна апаратура захищена металічною сіткою і

системою блокуючих пристроїв. Категорично забороняється знімати кожух рентгенівської трубки при ввімкненій напрузі. Перш ніж вмикати рентгенівську установку, пересвідчуються, чи немає біля апарату людей, перевіряють наявність води для охолодження, оглядають саму установку.

Ремонт установки проводиться при повному її відключенні і знятті залишкового заряду на високовольтних конденсаторах.

### *2.5 Протипожежні заходи при роботі.*

У випадку виникнення пожежі в лабораторії, потрібно обов'язково повідомити завідуючого лабораторією, в першу чергу виключити всі рентгенівські апарати та інші прилади, що живляться від електромережі. У лабораторії рентгенографії рідин як протипожежні заходи використовують вуглекислий вогнегасник типу ОУ-2, сухий пісок і войлочне покривало.

## *3. Аналіз впливу виробничих умов на довкілля.*

Основними чинниками можливого негативного впливу на навколишнє середовище під час виконання даної роботи є:

- Іонізуюче випромінювання рентгенівських трубок;
- Випари свинцю (Свинець служить матеріалом для захисту від іонізуючого випромінювання);
- Високочастотне електромагнітне поле, що генерується в джерелах високої напруги рентгенівських трубок.

Основні заходи спрямовані на мінімізацію негативного впливу на навколишнє середовище описані в розділі 2.

## Висновки

В цьому розділі було проаналізовано потенційні небезпеки, які можуть виникнути при виконанні магістерської роботи і розглянуто способи їх запобігання і усунення.

Завдяки правильному вибору робочого місця, його відповідності вимогам техніки безпеки, своєчасному контролю за обладнанням, забезпечення лабораторії протипожежним обладнанням було безпечно проведено виконання практичної частини дипломної роботи.

## Література


1. Кобевник М.Й. Охрана труда. Київ: Вища школа, 1990, с. 286.
2. Долин П.А. Основи техники безопасности в злектроустановках. - Москва: Знергоатомиздат, 1984, с. 448.
3. Трахтенберг І.М., Коршун М.М. Гігієна праці та виробнича санітарія. Київ: Основа, 1997, с. 265-274.
4. В.Хейне, М.Коэн, Д.Уэйр. Теория псевдопотенциала.–М.: Мир, 1973. –557 с. 2.
5. Э. А. Пастухов, Н.А.Ватолин, В. Л. Лисин, В. М. Денисов, С. В. Качин Дифракционные исследования высокотемпературных расплавов. – Екатеринбург: 2003. – 99 с.