
Diagnostics, Resource and Mechanics

of materials and structures

Editor-in-Chief: **Sergey V. Smirnov**
Deputy Editors-in-Chief: **Sergey V. Gladkovsky**
Deputy Editors-in-Chief: **Evgenii Yu. Prosviryakov**

Editorial Council

Anatoly A. Burenin (Russia)
Irina G. Goryacheva (Russia)
Janez Grum (Slovenia)
Mikhail P. Lebedev (Russia)
Leopold I. Leontiev (Russia)
Evgeny V. Lomakin (Russia)
Valery P. Matveenko (Russia)
Nikolay A. Makhutov (Russia)
Nikita F. Morozov (Russia)
Vladimir V. Moskvichev (Russia)
Sergey V. Panin (Russia)
Vasily M. Fomin (Russia)
Shao Wen-zhu (China)

Editorial Board

Boris V. Artemyev (Moscow)
Vladimir A. Bataev (Novosibirsk)
Aleksandr K. Belyaev (St.-Peterburg)
Vera V. Berezovskaya (Ekaterinburg)
Sergey V. Burov (Ekaterinburg)
Vladimir O. Vaskovsky (Ekaterinburg)
Dmitry I. Vichuzhanin (Ekaterinburg)
Mladen N. Georgiev (Sofia, Bulgaria)
Vladimir G. Degtyar (Miass)
Igor G. Emelyanov (Ekaterinburg)
Sergey M. Zadvorkin (Ekaterinburg)
Alexander G. Zalazinsky (Ekaterinburg)
Anatoly V. Kononov (Ekaterinburg)
Vladimir N. Kostin (Ekaterinburg)
Aleksey V. Makarov (Ekaterinburg)
Vladimir A. Mironov (Ekaterinburg)
Radik R. Mulyukov (Ufa)
Vitaly V. Muravyov (Izhevsk)
Aleksandr P. Nichipuruk (Ekaterinburg)
Oleg A. Plekhov (Perm)
Anna M. Povlotskaya (Ekaterinburg)
Nataliya B. Pugacheva (Ekaterinburg)
Igor Yu. Pyshmintsev (Chelyabinsk)
Anatoly B. Rinkevich (Ekaterinburg)
Roman A. Savray (Ekaterinburg)
Alexander S. Smirnov (Ekaterinburg)
Alexander I. Ulyanov (Izhevsk)
Yulia V. Khudorozhkova (Ekaterinburg)

Eelena E. Verstakova, editor of the English translation
Irina M. Tsiklina, editor of Russian texts
Anna V. Garieva, maker-up
Galina V. Torlopova, associate editor
Raul N. Shakirov, site admin

Postal address: Institute of Engineering Science, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, 34 Komsomolskaya st., 620049,
Ekaterinburg, Russian Federation
phone: +7 (343) 375-35-83,
fax: +7 (343) 374-53-30
e-mail: dream-journal@mail.ru
<http://dream-journal.org>

Главный редактор: Смирнов Сергей Витальевич, д.т.н.

Заместитель главного редактора: Сергей Викторович Гладковский, д.т.н.

Заместитель главного редактора: Евгений Юрьевич Просвирыков, д.ф.-м.н.

Редакционный совет:

Буренин Анатолий Александрович, член-корр. РАН, д.ф.-м.н. (Россия)

Горячева Ирина Георгиевна, академик РАН, д.ф.-м.н. (Россия)

Грум Янез, Ph.D., (Республика Словения)

Лебедев Михаил Петрович, член-корр. РАН, д.т.н. (Россия)

Леонтьев Леопольд Игоревич, академик РАН, д.т.н. (Россия)

Ломакин Евгений Викторович, член-корр. РАН, д.ф.-м.н. (Россия)

Матвеев Валерий Павлович, академик РАН, д.т.н. (Россия)

Махутов Николай Андреевич, член-корр. РАН, д.т.н. (Россия)

Морозов Никита Федорович, академик РАН, д.ф.-м.н. (Россия)

Москвичев Владимир Викторович, д.т.н. (Россия)

Панин Сергей Викторович, д.т.н. (Россия)

Фомин Василий Михайлович, академик РАН, д.ф.-м.н. (Россия)

Шао Вэнь-чжу, профессор (Китай)

Редакционная коллегия:

Артемьев Борис Викторович, д.т.н., (Москва)

Батаев Владимир Андреевич, д.т.н. (Новосибирск)

Беляев Александр Константинович, член-корр. РАН, д.ф.-м.н., (Санкт-Петербург)

Березовская Вера Владимировна, д.т.н., (Екатеринбург)

Буров Сергей Владимирович, к.т.н. (Екатеринбург)

Васьковский Владимир Олегович, д.ф.-м.н. (Екатеринбург)

Вичужанин Дмитрий Иванович, к.т.н. (Екатеринбург)

Георгиев Младен Николов, д.т.н. (София, Республика Болгария)

Дегтярь Владимир Григорьевич, академик РАН, д.т.н. (Миасс)

Емельянов Игорь Георгиевич, д.т.н. (Екатеринбург)

Задворкин Сергей Михайлович, к.ф.-м.н. (Екатеринбург)

Залазинский Александр Георгиевич, д.т.н. (Екатеринбург)

Коновалов Анатолий Владимирович, д.т.н. (Екатеринбург)

Костин Владимир Николаевич, д.т.н. (Екатеринбург)

Макаров Алексей Викторович, член-корр. РАН, д.т.н. (Екатеринбург)

Миронов Владимир Александрович, д.м.н. (Екатеринбург)

Мулюков Радик Рафикович, член-корр. РАН, д.ф.-м.н. (Уфа)

Муравьев Виталий Васильевич, д.т.н. (Ижевск)

Ничипурук Александр Петрович, д.т.н. (Екатеринбург)

Плехов Олег Анатольевич, д.ф.-м.н. (Пермь)

Поволоцкая Анна Моисеевна, к.т.н. (Екатеринбург)

Пугачева Наталия Борисовна, д.т.н. (Екатеринбург)

Пышминцев Игорь Юрьевич, д.т.н. (Челябинск)

Ринкевич Анатолий Брониславович, член-корр. РАН, д.ф.-м.н. (Екатеринбург)

Саврай Роман Анатольевич, к.т.н. (Екатеринбург)

Смирнов Александр Сергеевич, к.т.н. (Екатеринбург)

Ульянов Александр Иванович, д.т.н. (Ижевск)

Худорожкова Юлия Викторовна, к.т.н. (Екатеринбург)

Верстакова Елена Евгеньевна – редактор перевода текста на английский язык

Циклина Ирина Михайловна – редактор текста

Гариева Анна Валерьевна – верстальщик текста

Торлопова Галина Викторовна – помощник редактора

Шакиров Рауль Нурувич, к.т.н. – администратор сайта журнала

Адрес редакции:

Россия, 620049, г. Екатеринбург, ул. Комсомольская, д. 34., ИМАШ УрО РАН

телефон: +7 (343) 375 35 83, факс +7 (343) 374-53-30

e-mail: dream-journal@mail.ru

<http://dream-journal.org>

CONTENTS

Vykhodets V. B., Kurennykh T. E. <i>In-situ</i> nuclear reaction analysis	6
Chebodaeva V. V., Sedelnikova M. B., Bakina O. V., and Sharkeev Yu. P. Elemental composition of calcium phosphate coatings modified with Fe-Cu nanoparticles	15
Nikolaev A. L. The influence of 2 at. % Si addition on the annealing of radiation-induced defects in the Fe-13Cr alloy	23
Gorshkov A. V. and Prosviryakov E. Yu. Analytical study of the Ekman angle for the Benard–Marangoni convective flow of viscous incompressible fluid	34
Reizmunt E. M., Doronin S. V., and Moskvichev E. V. Information and analytical tools for assessing the structural survivability and safety of technological equipment	50

СОДЕРЖАНИЕ

Выходец В. Б., Куренных Т. Е. Метод ядерных реакций <i>in situ</i>	6
Чебодаева В. В., Седельникова М. Б., Бакина О. В., Шаркеев Ю. П. Элементный состав кальций-фосфатных покрытий модифицированных наночастицами Fe-Cu	15
Николаев А. Л. Влияние 2 ат. % Si на отжиг радиационных дефектов в сплаве Fe-13Cr ...	23
Горшков А. В., Просвиряков Е. Ю. Аналитическое исследование угла Экмана для конвективного течения Бенара-Марангони вязкой несжимаемой жидкости	34
Рейзмунт Е. М., Доронин С. В., Москвичев Е. В. Информационно-аналитические средства оценки конструкционной живучести и безопасности технологического оборудования	50

Received: 20.06.2021

Revised: 20.08.2021

Accepted: 27.08.2021

DOI: 10.17804/2410-9908.2021.4.006-014

IN-SITU NUCLEAR REACTION ANALYSIS

V. B. Vykhodets^{a)}, T. E. Kurennykh^{b)*}

*M.N. Miheev Institute of Metal Physics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,
18, S. Kovalevskoy St., Ekaterinburg, 620137, Russian Federation*

^{a)}  <http://orcid.org/0000-0001-9522-9147>;

^{b)}  <http://orcid.org/0000-0001-9859-3374>

*Corresponding author: E-mail: kurennykh@imp.uran.ru

Address for correspondence: 18, S. ul. Kovalevskoy, Ekaterinburg, 620990, Ekaterinburg, Russian Federation
Tel.: +7 (343) 378 38 46

The principles of in-situ nuclear reaction techniques and the need for them in various fields of scientific research are considered; several examples of the application of these techniques are given. It is shown that the techniques of in-situ nuclear reactions are effective in studying the diffusion of deuterium in metals at temperatures below room temperature, the diffusion of deuterium in proton-conducting oxides, the quantum diffusion of deuterium in metals at cryogenic temperatures, and the chemical composition of oxide nanopowders when they are heated in vacuum. Promising applications of nuclear reaction techniques in situ are formulated.

Keywords: nuclear reaction techniques, deuterium, metal, oxide, nanopowder.

Acknowledgment

The research was carried out within the state assignment from the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (theme "Function" No. AAAA-A19-119012990095-0).

References

1. The Stopping and Ranges of Ions in Matter (SRIM-2013): collection of software packages. Available at: <http://www.srim.org>.
2. Trakhtenberg I.Sh., Vladimirov A.B., Rubstein A.P., Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U. *The Stopping and Ranges of Ions in Solids*, Pergamon Press, N.Y., 1984, vol. 1.
3. Rubshtein A.P., Trakhtenberg I., Volkova E., Vladimirov A.B., Gontar A., Uemura K. The interrelation between structure and mechanical properties of CN_x films (0 ≤ x ≤ 0.5), deposited by arc sputtering of graphite. *Diamond and Related Materials*, 2005, vol. 14, pp. 1820–1823. DOI: 10.1016/J.DIAMOND.2005.07.016.
4. Trakhtenberg I.Sh., Vladimirov A.B., Rubstein A.P., Yugov V.A., Vykhodets V.B., Kurennykh T.E., Gontar A.G., Tkach V.N., Dub S.N., and Uemura K. Mechanical properties of CN_x coatings obtained by carbon arc sputtering. *Journal of Superhard Materials*, 2007, vol. 29, No. 3, pp. 138–141. DOI: 10.3103/S1063457607030045.
5. Rubstein A.P., Makarova E.B., Trakhtenberg I.Sh., Kudryavtseva I.P., Bliznets D.G., Philippov Yu.I., Shlykov I.L. Osseointegration of porous titanium modified by diamond-like carbon and carbon nitride. *Diamond and Related Materials*, 2012, vol. 22, pp. 128–135. DOI: 10.1016/j.diamond.2011.12.030.
6. Le Claire A. D. In: *Diffusion in Solid Metals and Alloys*, ed. by H. Mehrer, 1990, Group III, vol. 26, Landolt-Börnstein, Springer-Verlag, Berlin, p. 471.
7. Kidson G.V. In: *Diffusion in Solid Metals and Alloys*, ed. by H. Mehrer, 1990, Group III, vol. 26, Landolt-Börnstein, Springer-Verlag, Berlin, p. 504.

8. Amsel G., Lanford W.A. Nuclear reaction techniques in materials analysis. *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.*, 1984, vol. 34, pp. 435–460. DOI:10.1146/annurev.ns.34.120184.002251.
9. David D., Garcia E.A., Lucas X., Břranger G. Etude de la diffusion de l'oxygene dans le titane 6 oxyde entre 700°C et 950°C. *Journal of the Less Common Metals*, 1979, vol. 65, No. 1, pp. 51–69. DOI: 10.1016/0022-5088(79)90152-8.
10. Kreuer K.D. On the complexity of proton conduction phenomena. *Solid State Ionics*, 2000, vol. 136–137 (1–2), pp. 149–160. DOI: 10.1016/S0167-2738(00)00301-5.
11. Kreuer K.D., Adams St., Mñch W., Fuchs A., Klock U., Maier J. Proton conducting alkaline earth zirconates and titanates for high drain electrochemical applications. *Solid State Ionics*, 2001, vol. 145, pp. 295–306. DOI: 10.1016/S0167-2738(01)00953-5.
12. Kreuer K.D. Proton-Conducting Oxides. *Annu. Rev. Mater. Res.*, 2003, vol. 33, pp. 333–359. DOI: 10.1146/annurev.matsci.33.022802.091825.
13. Pionke M., Mono T., Schweika W., Springer T., Schober H. Investigation of the hydrogen mobility in a mixed perovskite: Ba[Ca(1+x)/3Nb(2-x)/3]O3-x/2 by quasielastic neutron scattering. *Solid State Ionics*, 1997, vol. 97, pp. 497–504. DOI: 10.1016/S0167-2738(97)00077-5.
14. Karmonik Ch., Hempelmann R., Matzke Th., Springer T. Proton Diffusion in Strontium Cerate Ceramics studied by Quasielastic Neutron Scattering and Impedance Spectroscopy. *Zeitschrift for Naturforschung A*, 1995, vol. 50 (6), pp. 539–548. DOI: 10.1515/zna-1995-0605.
15. Qi Z., Volkl J., Lasser R., Wenzl H. Tritium diffusion in V, Nb and Ta. *J. Phys. F: Met. Phys.*, 1983, vol. 13, pp. 2053–2062. DOI: 10.1088/0305-4608/13/10/015.
16. Kashlev Y.A. Three regimes of diffusion migration of hydrogen atoms in metals. *Theor. Math. Phys.*, 2005, vol. 145, pp. 1590–1603. DOI: 10.1007/s11232-005-0185-8.
17. Sundell P.G., Wahnström G. Activation energies for quantum diffusion of hydrogen in metals and on metal surfaces using delocalized nuclei within the density-functional theory. *Phys. Rev. Lett.*, 2004, vol. 92 (15), pp. 155901. DOI: 10.1103/PhysRevLett.92.155901.
18. Di Stefano D., Mrovec M., Elsässer C. First-principles investigation of quantum mechanical effects on the diffusion of hydrogen in iron and nickel. *Phys. Rev. B*, 2015, vol. 92, pp. 224301. DOI: 10.1103/PhysRevB.92.224301.
19. Vykhodets V., Nefedova O., Kurennykh T., Obukhov S., Vykhodets Y. Quantum Diffusion of Deuterium in Sodium. *J. Phys. Chem. A*, 2019, vol. 123 (34), pp. 7536–7539. DOI: 10.1021/acs.jpca.9b06231.
20. Kudo H., Kosaku Y., Ando Y., Higara M., Sekine T. Deuterium migration in titanium during deuteron irradiation observed by proton spectra of the d(d,p)t reaction. *Journal of Nuclear Materials*, 1998, vols. 258–263, part 1, pp. 622–627. DOI: 10.1016/S0022-3115(98)00244-X.
21. Vykhodets Vladimir B., Jarvis Emily A.A., Kurennykh Tatiana E., Beketov Igor V., Obukhov Sviatoslav I., Samatov Oleg M., Medvedev Anatoly I., Davletshin Andrey E., Whyte Travis H. Inhomogeneous depletion of oxygen ions in oxide nanoparticles. *Surface Science*, 2016, vol. 644, pp. 141–147. DOI: 10.1016/j.susc.2015.10.011.

Подана в журнал: 20.06.2021

УДК 53.083.9

DOI: 10.17804/2410-9908.2021.4.006-014

МЕТОД ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ *IN SITU*

В. Б. Выходец^{а)}, Т. Е. Куренных^{б)*}

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт физики металлов им. М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук,
д. 18, ул. С. Ковалевской, г. Екатеринбург, Российская Федерация

^{а)}  <http://orcid.org/0000-0001-9522-9147>;

^{б)}  <http://orcid.org/0000-0001-9859-3374>

*Ответственный автор. Электронная почта: kurennykh@imp.uran.ru

Адрес для переписки: ул. С. Ковалевской, 18, г. Екатеринбург, Российская Федерация

Тел.: +7 (343) 378–38–46

Рассмотрены принципы методик ядерных реакций *in situ*, потребность в них в различных областях научных исследований и приведены несколько примеров применения этих методик. Показано, что методики ядерных реакций *in situ* эффективны при исследовании диффузии дейтерия в металлах при температурах ниже комнатной, диффузии дейтерия в протонпроводящих оксидах, квантовой диффузии дейтерия в металлах при криогенных температурах и химического состава оксидных нанопорошков при их нагреве в вакууме. Сформулированы перспективные направления использования методик ядерных реакций *in situ*.

Ключевые слова: метод ядерных реакций, дейтерий, металл, оксид, нанопорошок.

1. Введение

Первые исследования с помощью метода ядерных реакций (NRA) были выполнены в середине прошлого века. NRA получил широкое распространение и в течение нескольких десятков лет является одним из самых эффективных прямых методов определения концентраций изотопов легких элементов в твердых телах, их концентрационных профилей в образцах, применялся при исследовании диффузии легких элементов в твердых телах, химического состава тонких пленок и покрытий и в других областях физики, химии и материаловедения. Метод NRA предполагает облучение образцов на ускорителе и регистрацию продуктов ядерных реакций, протекающих во время облучения, между ускоренными частицами и содержащимися в образцах атомами легких элементов. Примерами таких реакций являются $^{18}\text{O}(p,\alpha)^{15}\text{N}$ и $^{16}\text{O}(d,p_1)^{17}\text{O}$. Они иллюстрируют изотопную чувствительность методики. Наиболее часто в исследованиях с помощью NRA используют протоны и дейтроны с энергиями до нескольких МэВ и регистрируют протоны и α -частицы также с энергиями до нескольких МэВ.

Метод нашел широкое применение, поскольку его преимуществами были изотопная чувствительность, высокая точность при измерении концентраций легких элементов, высокая чувствительность при измерении низких концентраций (до 10^{-3} ат. %), возможность измерения концентрационных профилей изотопов без разрушения образца с разрешением по глубине от 0,1 мкм до глубины в образце около 2 мкм, локальность измерений по поверхности образца на уровне 0,1 мм, абсолютный характер измерений концентраций (это обусловлено тем, что сечения ядерных реакций являются их фундаментальными характеристиками). Распространению NRA способствовало несколько обстоятельств. Во-первых, атомы легких элементов даже при очень низких концентрациях сильно влияют на свойство металлов, они входят в качестве основных компонентов в состав оксидов, нитридов, карбидов и других со-

единений. Во-вторых, измерение концентраций легких элементов было большой проблемой для существующих методов исследования элементного и изотопного состава твердых тел, дополнительно к этому для легких элементов практически отсутствуют радиоактивные изотопы с характеристиками, приемлемыми для диффузионных исследований. Научно-методической базой методики NRA являются многочисленные результаты по сечениям ядерных реакций, тормозным способностям элементов, длинам пробега ускоренных ионов в материалах и другая информация [1, 2]

Среди важных результатов, полученных с помощью NRA, можно отметить данные по коэффициентам диффузии атомов легких элементов в металлах и оксидах, составу пленок и покрытий, металлургии титановых сплавов, синтезу оксидных нанопорошков и др. [3–8]. Основным конкурентом методики NRA в течение многих лет была вторичная ионная масс-спектрометрия.

В последние годы прогресс в применении некоторых методик в измерении концентраций легких элементов в твердых телах был значительным. Прежде всего нужно отметить появление спектральных приборов компании LECO, с помощью которых концентрации кислорода, водорода и азота в твердых телах могут быть определены с чувствительностью до 10^{-6} ат. %, что на несколько порядков превосходит возможности NRA. В то же время преимуществами NRA перед спектрометрами LECO остаются изотопная чувствительность и высокая локальность измерений по поверхности и глубине в образце. Отметим, что в приборах LECO необходимая масса образца для анализа составляет 1 г. В последнее время вырос интерес к разработке материалов для литийсодержащих аккумуляторов и NRA применяется в этих исследованиях, поскольку превосходит возможности других методик для измерения концентраций лития. В данном случае речь идет не о прогрессе в использовании NRA, а о ее традиционном применении. Новым же подходом, который имел место при развитии методик NRA, является их использование в режиме *in situ*, и настоящая работа ориентирована на анализ первых результатов в этом направлении.

2. Причины для применения методик NRA *in situ*

В нескольких работах последних лет обозначились новые тенденции в развитии метода NRA. Они направлены на проведение измерения концентрационных профилей изотопов легких элементов непосредственно во время процесса – предмета научного исследования. Это может быть, например измерение концентрационных профилей атомов во время диффузии или в процессе формирования тех или иных сегрегаций или определение состава образца по легким элементам при протекании фазовых превращений. Существует несколько объективных причин для применения методик NRA *in situ*, приведем несколько примеров.

Для атомов самого легкого элемента водорода для некоторых типов твердых тел, в частности протонпроводящих оксидов, характерны высокие значения коэффициентов диффузии водорода даже при комнатной температуре. По этой причине для таких случаев не приемлемы традиционные постановки диффузионных экспериментов, при которых диффузионные отжиги образцов проводят при высоких или повышенных температурах, а измерение концентрационных профилей – при комнатной температуре. В связи с этим в протонпроводящих оксидах для получения данных по коэффициентам диффузии водорода применяли не прямые методы, например протонную проводимость [9–13]. Использование не прямых методов для измерения коэффициентов диффузии водорода в твердых телах получило широкое распространение, однако в любом случае применение для этой цели прямых методов, основанных на диффузионных уравнениях Фика, является актуальной задачей. В работе мы не останавливаемся подробно на роли прямых и не прямых методов исследования, ограничимся ремаркой, что для получения информации о механизмах миграции атомов в твердых телах необходимо применение тех и других подходов.

Следующий пример также связан с диффузией, причем он имеет фундаментальное значение. Существуют всего два механизма миграции атомов в твердых телах: надбарьерные прыжки атомов (классический механизм) и туннелирование (квантовый). Почти все опытные данные по диффузии относятся к классическому механизму миграции, однако в случае атомов легких элементов большой практический и теоретический интерес представляют диффузионные данные для квантового механизма миграции [14–17]. Они актуальны для теорий диффузии, квантовой химии, низкотемпературных технологий и астрофизики, прежде всего для водорода в связи с его участием во многих природных и технологических процессах. Поскольку квантовую диффузию наблюдают только при температурах ниже комнатной, в этих случаях, очевидно, не может быть применена традиционная схема диффузионных экспериментов, при которой измерение диффузионных профилей атомов проводится при комнатной температуре. Таким образом, приходим к заключению, что в случае изотопов водорода при температурах, близких или ниже комнатной, актуальны постановки диффузионных исследований в режиме *in situ*.

Применение методики NRA *in situ* может быть актуально не только для измерения концентрационных профилей водорода, а также для такого класса материалов как оксидные и другие нанопорошки и наноразмерные пленки. Дело в том, что химический состав наночастиц и тонких пленок из-за их большой удельной поверхности и высокой химической активности сильно изменяется при хранении на воздухе и исследование состава наночастиц и пленок по водороду, кислороду и другим легким элементам с использованием методики NRA целесообразно проводить в условиях, когда их пребывание на воздухе в течение всего цикла исследований исключено. Мы рассмотрели некоторые частные примеры и можно констатировать, что они показывают высокую потребность в развитии методик NRA *in situ* для материаловедения, электрохимии, наноматериалов, квантовой диффузии в металлах и других научных направлений. Далее в работе рассмотрены основные принципы методик NRA *in situ*, а также некоторые первые научные результаты, полученные с их помощью.

3. Принципы методик NRA *in situ*

В литературе упоминаются следующие принципы, которые могут быть использованы при разработке методик NRA *in situ*. Первый из них связан с температурными условиями экспериментов при использовании методики NRA, которые обычно проводят при комнатной температуре. В такой постановке предметом исследований являются концентрационные профили атомов, сформированные при высокотемпературных процессах, например синтезе, выплавке, диффузионном отжиге или хранении образцов в тех или иных условиях. В таких случаях речь не идет о режимах *in situ* и необходимым условием их реализации является возможность проведения исследований с использованием NRA в широком интервале температур. В целом это традиционная задача для многих методик, например для электронной и оптической микроскопии, и в случае NRA можно отметить только наличие естественной верхней границы для температуры образца около 500 °С, более высокие температуры противопоказаны применению кремниевых поверхностно-барьерных детекторов, используемых для регистрации продуктов ядерных реакций. В работах [18, 19] для нагрева и охлаждения образцов использовали резистивную печь и проточный жидкий азот, в этом случае температура кипения жидкого азота была нижней границей диффузионных исследований.

При диффузионных исследованиях важным вопросом, связанным с температурными условиями экспериментов, является точность поддержания и измерения температуры при проведении изотермических отжигов в вакуумной камере ускорительной установки. Эта задача не вполне тривиальна, поскольку поддержание необходимого температурного режима осуществляется во время облучения образцов, подачи в камеру ускорительной установки жидкого азота и эксплуатации резистивной печи. Задача носит многопараметрический характер, поскольку функционирование каждого из перечисленных факторов

приводит к колебаниям температуры образца. Задача поддержания постоянной температуры образца в вакуумной камере ускорительной установки не может быть решена при помощи традиционных регуляторов, здесь необходимы специальные подходы. Можно констатировать, что удовлетворительное решение задачи было найдено, например в работе [18], где температуру образца при диффузионных отжигах поддерживали постоянной и измеряли с точностью ± 1 К. Высокая точность стабилизации температуры в упомянутых работах достигалась за счет того, что колебания мощности нагревателя, тока пучка и тепловых потоков в камере ускорителя при облучении автоматически компенсировались изменениями теплового потока от пластины с образцом к массивному теплообменнику, охлаждаемому проточным жидким азотом. Кроме того, в этих работах предпринимались независимые меры для стабилизации тока пучка ускорителя, потока жидкого азота через теплообменник в камере ускорительной установки и мощности резистивного нагревателя. Таким образом, для методики NRA *in situ* может быть обеспечен температурный интервал исследований примерно от 80 до 800 К с точностью поддержания температуры образца при изотермических отжигах, достаточной для диффузионных исследований.

Второй принцип методики NRA *in situ* заключается в использовании ионов пучка ускорителя для двух целей: легирования ими образца и проведения ядерной реакции. Это положение удобно проиллюстрируем на частном примере. При облучении дейтронами происходит их имплантация в образец, в результате ионы дейтерия распределяют в образце в соответствии с теми или иными физико-химическими процессами. Это могут быть, например, фазовые превращения, формирование диффузионных распределений, формирование сегрегаций атомов на примесях, границах образца, дефектах решетки и т. д. Параллельно с этими процессами протекает ядерная реакция ${}^2\text{H}(d,p){}^3\text{H}$ между имплантированными атомами дейтерия ${}^2\text{H}$ и ионами пучка d с выходом высокоэнергетических протонов p , спектры которых регистрируются с помощью полупроводниковых детекторов. Ясно, что с помощью такой схемы эксперимента можно *in situ* получить информацию о физико-химических процессах, происходящих с атомами дейтерия в материале. Этот принцип организации эксперимента может представлять интерес по нескольким причинам. Во-первых, он сочетает достоинства методик имплантации и NRA, поскольку позволяет получать информацию о поведении водорода, например диффузии и фазовых превращениях в материалах, в которые водород нельзя ввести с помощью отжигов. В частности, это могут быть металлы, в которых водород практически нерастворим или которые разрушаются при отжигах в агрессивных водородосодержащих средах. Во-вторых, у такого подхода есть важные преимущества перед традиционными постановками эксперимента. Они обуславливают расширение диапазона измеряемых значений коэффициентов диффузии водорода или интервала температур, для которого могут быть получены результаты по тому или иному явлению. Эти вопросы нуждаются в специальных исследованиях, но в любом случае преимущества подходов, связанных с применением методик NRA *in situ*, очевидны, поскольку имплантация возможна при любых температурах образца, а другие способы ввода атомов водорода в материалы образца обычно требуют повышенных температур.

Мы привели частный пример использования методики NRA *in situ*, когда для целей легирования образца и проведения ядерной реакции используются ионы дейтерия. Вероятно, аналогичные варианты могут быть предложены для других ускоренных частиц.

4. Примеры и перспективы применения методик NRA *in situ*

Примеры применения методик NRA *in situ* пока не многочисленны, и мы остановимся только на двух результатах. В работе [20] было проведено исследование отклонений от стехиометрии в наночастицах YSZ10 – кубического диоксида циркония, допированного 10 мол. % иттрия. С помощью NRA и изотопных методов было установлено, что на этапе высокотем-

пературного синтеза нанопорошка, который проводился с помощью технологии лазерного испарения керамической мишени, имел место сильный кислородный дефицит в поверхностном атомном слое наночастиц. Этот эффект был прогнозируем теорией. Однако при комнатной температуре порошка отклонений от стехиометрии практически не было, т. е. при охлаждении на воздухе происходило окисление наночастиц. Установить механизм этого окисления не представлялось возможным, поскольку пребывание порошка на воздухе и его взаимодействие с окружающей атмосферой было неизбежным этапом при работе с порошками. В связи с этим в работе [20] была применена методика NRA *in situ*, а именно, проводилось измерение концентрации кислорода в порошке с помощью методик NRA во время нагрева порошка непосредственно в вакуумной камере ускорительной установки. По результатам этого исследования удалось установить, что термодинамически равновесный кислородный дефицит в кристаллической решетке наночастицы сохраняется до комнатной температуры, а изменение состава порошка при охлаждении на воздухе обусловлено процессами абсорбции и хемосорбции водяных паров, углекислого газа и кислорода.

Результаты этого эксперимента показывают, что методика NRA *in situ* имеет перспективы не только в аналогичных применениях, но и для получения данных по температурной зависимости коэффициентов диффузии легких элементов при температурах, которые незначительно выше комнатной. Объектами исследования в этих случаях могут быть, например, оксидные нанопорошки, подвергнутые предварительному стабилизирующему отжигу в атмосфере кислорода.

Другой пример использования методики NRA *in situ* связан с исследованием температурной зависимости коэффициентов диффузии дейтерия в щелочном металле натрия [18]. Отметим, что в литературе отсутствовали опытные данные по диффузии изотопов водорода в щелочных металлах. Такое положение связано с тем, что они являются неудобными объектами для диффузионных исследований. Осложняющими факторами являются, в частности, образование гидридов при отжиге щелочных металлов в водороде и их окисление даже при низких парциальных давлениях кислорода. Эта же ситуация имеет место со многими лантаноидами и щелочноземельными металлами, для них также характерно почти полное отсутствие экспериментальных данных по диффузии водорода [6].

Задача измерения коэффициентов диффузии дейтерия в натрия решалась с помощью подхода, при использовании которого ионная имплантация, диффузионный отжиг и измерение диффузионного распределения атомов дейтерия осуществлялись одновременно. Измерение концентрационного профиля ионов дейтерия проводилось с помощью методики NRA, использовалась реакция ${}^2\text{H}(d, p){}^3\text{H}$. Пучок дейтронов использовался как для имплантации ионов дейтерия в образец, так и для измерений концентрации дейтерия в образце. Идея такого эксперимента впервые была предложена в работе [19]. Эта методика получила название nuclear reaction analysis on-line (NRAOL), она является вариантом методики NRA *in situ*. Дополнительно к этому в работе [18] был решен вопрос о применении методики NRA для исследования материалов, которые легко окисляются на воздухе и в состоянии поставки хранятся в стеклянных ампулах, керосине и других изолирующих средах. Для этого использовался герметичный транспортный контейнер. Ампулы с натрием вскрывали в боксе в атмосфере аргона с содержанием кислорода и водяного пара не более 0,5 ppm. В боксе натрий переносили в герметичный транспортный контейнер, его переносили в камеру ускорительной установки и вскрывали только после получения в камере высокого вакуума.

В работе [18] данные по диффузии дейтерия в натрия были получены в интервале температур от 110 до 240 К в диапазоне значений коэффициентов диффузии от 10^{-16} до 10^{-12} м²/с. Это на настоящее время самый существенный результат, полученный с помощью метода NRA *in situ*. Он свидетельствует о том, что при помощи этой методики могут быть ликвидированы «белые пятна» в опытных данных по диффузии водорода в лантаноидах, щелочных, щелочноземельных и других металлах, которые не могут быть подвергнуты диффузионному отжигу в водородосодержащих средах. Также эти результаты показывают, что при использо-

вании метода NRA *in situ* могут быть получены данные по диффузии дейтерия во всех материалах при температурах ниже комнатной.

5. Заключение

Показано, что для получения экспериментальных данных по диффузии легких элементов в твердых телах во многих случаях целесообразно применять ускорительную методику ядерных реакций *in situ*. Одним из возможных условий ее реализации является нагрев, охлаждение и изотермический отжиг образца в вакуумной камере ускорительной установки одновременно с его облучением и регистрацией продуктов ядерных реакций. Другим вариантом может быть использование пучка ускорителя одновременно для измерения концентрационных профилей легкого элемента в образце и его легирования. Приведены примеры применения методики ядерных реакций *in situ*, впервые выполнены исследования температурной зависимости коэффициентов диффузии водорода в щелочном металле и установлена природа отклонений от стехиометрии в оксидных наночастицах.

Благодарность

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Функция», № АААА-А19-119012990095-0)

Литература

1. The Stopping and Ranges of Ions in Matter (SRIM-2013): collection of software packages. – URL: <http://www.srim.org>.
2. Ziegler J. F., Biersack J. P., Littmark U. The Stopping and Ranges of Ions in Solids. – N.Y. : Pergamon Press, 1984. – Vol. 1.
3. The interrelation between structure and mechanical properties of CN_x films (0 ≤ x ≤ 0.5), deposited by arc sputtering of graphite / A. P. Rubshtein, I. Sh. Trakhtenberg, E. G. Volkova, A. B. Vladimirov, A. G. Gontar, K. Uemura // Diamond and Related Materials. – 2005. – Vol. 14. – P. 1820–1823. – DOI: 10.1016/J.DIAMOND.2005.07.016.
4. Mechanical properties of CN_x coatings obtained by carbon arc sputtering / I. Sh. Trakhtenberg, A. B. Vladimirov, A. P. Rubstein, V. A. Yugov, V. B. Vykhodets, T. E. Kurennykh, A. G. Gontar, V. N. Tkach, S. N. Dub, and K. Uemura // Journal of Superhard Materials. – 2007. – Vol. 29, No. 3. – P. 138–141. – DOI: 10.3103/S1063457607030045.
5. Osseointegration of porous titanium modified by diamond-like carbon and carbon nitride / A. P. Rubstein, E. B. Makarova, I. Sh. Trakhtenberg, I. P. Kudryavtseva, D. G. Bliznets, Yu. I. Philippov, I. L. Shlykov // Diamond and Related Materials. – 2012. – Vol. 22. – P. 128–135. – DOI: 10.1016/j.diamond.2011.12.030.
6. Diffusion in Solid Metals and Alloys / ed. by H. Mehrer / A. D. Le Claire. – 1990. – Group III, vol. 26. – Berlin : Landolt-Börnstein, Springer-Verlag, 1990. – P. 471.
7. Diffusion in Solid Metals and Alloys / ed. by H. Mehrer / G. V. Kidson. – 1990. – Group III, vol. 26. – Berlin : Landolt-Börnstein, Springer-Verlag, 1990 – P. 504.
8. Amsel G., Lanford W. A. Nuclear reaction techniques in materials analysis // Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. – 1984. – Vol. 34. – P. 435–460. – DOI: 10.1146/annurev.ns.34.120184.002251.
9. Etude de la diffusion de l'oxygene dans le titane 6 oxyde entre 700 °C et 950 °C / D. David, E. A. Garcia, X. Lucas, G. Břranger // Journal of the Less Common Metals. – 1979. – Vol. 65, No. 1. – P. 51–69. – DOI: 10.1016/0022-5088(79)90152-8.
10. Kreuer K. D. On the complexity of proton conduction phenomena // Solid State Ionics. – 2000. – Vol. 136–137 (1–2). – P. 149–160. – DOI: 10.1016/S0167-2738(00)00301-5.
11. Proton conducting alkaline earth zirconates and titanates for high drain electrochemical applications / K. D. Kreuer, St. Adams, W. Münch, A. Fuchs, U. Klock, J. Maier // Solid State Ionics. – 2001. – Vol. 145. – P. 295–306. – DOI: 10.1016/S0167-2738(01)00953-5.

12. Kreuer K. D. Proton-Conducting Oxides // *Annu. Rev. Mater. Res.* – 2003. – Vol. 33. – P. 333–359. – DOI: 10.1146/annurev.matsci.33.022802.091825.
13. Investigation of the hydrogen mobility in a mixed perovskite: $\text{Ba}[\text{Ca}(1+x)/3\text{Nb}(2-x)/3]\text{O}_{3-x/2}$ by quasielastic neutron scattering / M. Pionke, T. Mono, W. Schweika, T. Springer, H. Schober // *Solid State Ionics.* – 1997. – Vol. 97. – P. 497–504. – DOI: 10.1016/S0167-2738(97)00077-5.
14. Proton Diffusion in Strontium Cerate Ceramics studied by Quasielastic Neutron Scattering and Impedance Spectroscopy / Ch. Karmonik, R. Hempelmann, Th. Matzke, T. Springer // *Zeitschrift for Naturforschung A.* – 1995. – Vol. 50 (6). – P. 539–548. – DOI: 10.1515/zna-1995-0605.
15. Tritium diffusion in V, Nb and Ta / Z. Qi, J. Volkl, R. Lasser, H. Wenzl // *J. Phys. F: Met. Phys.* – 1983. – Vol. 13. – P. 2053–2062. – DOI: 10.1088/0305-4608/13/10/015.
16. Kashlev Y. A. Three regimes of diffusion migration of hydrogen atoms in metals // *Theor. Math. Phys.* – 2005. – Vol. 145. – P. 1590–1603. – DOI: 10.1007/s11232-005-0185-8.
17. Sundell P. G., Wahnström G. Activation energies for quantum diffusion of hydrogen in metals and on metal surfaces using delocalized nuclei within the density-functional theory // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – Vol. 92 (15). – P. 155901. – DOI: 10.1103/PhysRevLett.92.155901.
18. Di Stefano D., Mrovec M., Elsässer C. First-principles investigation of quantum mechanical effects on the diffusion of hydrogen in iron and nickel // *Phys. Rev. B.* – 2015. – Vol. 92. – P. 224301. – DOI: 10.1103/PhysRevB.92.224301.
19. Quantum Diffusion of Deuterium in Sodium / V. Vykhodets, O. Nefedova, T. Kurennykh, S. Obukhov, Y. Vykhodets // *J. Phys. Chem. A.* – 2019. – Vol. 123. – P. 7536–7539. – DOI: 10.1021/acs.jpca.9b06231.
20. Deuterium migration in titanium during deuteron irradiation observed by proton spectra of the $d(d,p)t$ reaction / H. Kudo, Y. Kosaku, Y. Ando, M. Higara, T. Sekine // *Journal of Nuclear Materials.* – 1998. – Vols. 258–263 (1). – P. 622–627. – DOI: 10.1016/S0022-3115(98)00244-X.
21. Inhomogeneous depletion of oxygen ions in oxide nanoparticles / Vladimir B. Vykhodets, Emily A. A. Jarvis, Tatiana E. Kurennykh, Igor V. Beketov, Sviatoslav I. Obukhov, Oleg M. Samatov, Anatoly I. Medvedev, Andrey E. Davletshin, Travis H. Whyte // *Surface Science.* – 2016. – Vol. 644. – P. 141–147. – DOI: 10.1016/j.susc.2015.10.011.

Received: 15.06.2021
Revised: 15.08.2021
Accepted: 27.08.2021
DOI: 10.17804/2410-9908.2021.4.015-022

ELEMENTAL COMPOSITION OF CALCIUM PHOSPHATE COATINGS MODIFIED WITH Fe-Cu NANOPARTICLES

V. V. Chebodaeva^{a)*}, M. B. Sedelnikova^{b)}, O. V. Bakina^{c)}, and Yu. P. Sharkeev^{d)}

*Institute of Strength Physics and Materials Science, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences,
2/4 Akademicheskii Ave., Tomsk, 634055, Russian Federation*

- a)  <http://orcid.org/0000-0002-1980-3941>  vtina5@mail.ru;
b)  <http://orcid.org/0000-0002-5741-6053>  smasha5@yandex.ru;
c)  <http://orcid.org/0000-0002-8650-6939>  ovbakina@ispms.tsc.ru;
d)  <http://orcid.org/0000-0001-5037-245X>  sharkeev@ispms.tsc.ru

*Corresponding author. E-mail: vtina5@mail.ru

Address for correspondence: Akademicheskii pr., 8/3, Tomsk, 634021, Russian Federation
Tel.: +7 (382) 286 69 11

The object of research is calcium-phosphate coatings doped with Fe-Cu nanoparticles. The elemental composition of the calcium-phosphate (CaP) coatings deposited by the microarc oxidation (MAO) method at a voltage of 250 V is studied. The quantitative content and distribution of Ca, P, O, Ti, Fe, and Cu over the coating surface prove to depend on the introduced additional electrolyte components. After modification with Fe-Cu nanoparticles, the Ca content increases from 4.5 at. % to 6.7 at. %. The amount of P and Ti after the introduction of nanoparticles increases from 11.7 to 22.3 at. % and from 7.9 to 15.8 at. %. Oxygen concentration, on the contrary, decreases from 75.9 to 55.0 at. %.

Keywords: calcium-phosphate coatings, hydroxyapatite, Fe-Cu nanocomposite particles, nanoparticles, microarc oxidation.

Acknowledgment

We are thankful to Dr. M.V. Chaikina, leading researcher at the laboratory of intercalation and mechanochemical reactions of the ISSCM SB RAS, for the preparation of stoichiometric hydroxyapatite and to Mr. A. I. Tolmachev, chief expert at the laboratory of nanostructural biocomposites of the ISPMS SB RAS for his assistance in the preparation of titanium plates.

The work was performed within the state assignment to the ISPMS SB RAS, project FWRW-2021-0007.

References

1. Sharkeev Y.P., Psakhie S.G., Legostaeva E.V., Knyazeva A.G., Smolin A.Y., Eroshenko A.Y., Konovalenko I.S., Nazarenko N.N., Belyavskaya O.A., Kulyashova K.S., Komarova E.G., Tolkacheva T.V., Khlusov I.A., Zaitsev K.V., Khlusova M.Y., Polenichkin V.K., Sergienko V.I., Gnedenkov S.V., Sinebryukhov S.L., Puz' A.V., Khrisanfova O.A., Egorkin V.S., Zavidnaya A.G., Terleeva O.P., Mironov I.V., Slonova A.I., Lyamina G.V., Fortuna S.V., Yakovlev V.I., Kulakov A.A., Gvetadze R.S., Khamraev T.K., Abramian S.V. *Biokompozity na osnove kaltsiyfosfatnykh pokrytiy, nanostrukturnykh i ultramelkozernistykh bioinertnykh metallov, ikh biosovmestimost i biodegradatsiya* [Biocomposites based on calcium-phosphate coatings, nanostructured and ultrafine-

grained bioinert metals, their biocompatibility and biodegradation]. Tomsk, Izdatelskiy Dom Tomskogo Gosudarstvennogo Universiteta Publ., 2014, 596 p. (In Russian).

2. Li J., Qin L., Yang K., Ma Z., Wang Y., Cheng L., Zhao D. Materials evolution of bone plates for internal fixation of bone fractures: A review. *Journal of Materials Science & Technology*, 2020, vol. 36, pp. 190–208. DOI: 10.1016/j.jmst.2019.07.024.
3. Mourico V., Cattalini J.P., Roether J.A., Dubey P., Roy I., Boccaccini A.R. Composite polymer-bioceramic scaffolds with drug delivery capability for bone tissue engineering. *Expert Opinion on Drug Delivery*, 2013, vol. 10 (10), pp. 1353–1365. DOI: 10.1517/17425247.2013.808183.
4. Sedelnikova M.B., Ugodchikova A.V., Uvarkin P.V., Chebodaeva V.V., Tolkacheva T.V., Schmidt D., Sharkeyev Yu.P. Structural, morphological and adhesive properties of calcium phosphate coatings formed on magnesium alloy by micro-arc oxidation method in electrolyte containing dispersed particles. *Russian Physics Journal*, 2021. DOI: 10.1007/s11182-021-02398-z.
5. Sedelnikova M.B., Ugodchikova A.V., Tolkacheva T.V., Chebodaeva V.V., Cluklhov I.A., Khimich M.A., Bakina O.V., Lerner M.I., Egorkin V.S., Schmidt J., Sharkeev Y.P. Surface modification of Mg0.8Ca alloy via wollastonite micro-arc coatings: Significant improvement in corrosion resistance. *Metals*, 2021, vol. 11 (5), 754. DOI: 10.3390/met11050754.
6. Karbowniczek J., Muhaffel F., Cempura G., Cimenoglu H., Czyrska-Filemonowicz A. Influence of electrolyte composition on microstructure, adhesion and bioactivity of micro-arc oxidation coatings produced on biomedical Ti6Al7Nb alloy. *Surface and Coatings Technology*, 2017, vol. 321, pp. 97–107. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2017.04.031.
7. Simchen F., Sieber M., Kopp A., Lampke T. Introduction to plasma electrolytic oxidation—an overview of the process and applications. *Coatings*, 2020, vol. 628 (10). DOI: 10.3390/coatings10070628.
8. Dorozhkin S.V. Calcium orthophosphate deposits: Preparation, properties and biomedical applications. *Materials Science and Engineering C*, 2015, vol. 55, pp. 272–326. DOI: 10.1016/j.msec.2015.05.033.
9. Khan R.H.U., Yerokhin A.L., Li X., Dong H., Matthews A. Influence of current density and electrolyte concentration on DC PEO titania coatings. *Surface Engineering*, 2014, vol. 30 (2), pp. 102–108. DOI: 10.1179/1743294413Y.00000000225.
10. Chebodaeva V.V., Nazarenko N.N., Sedelnikova M.B., Gnedenkov S.V., Egorkin V.S., Sinebryukhov S.L., and Sharkeev Yu.P. Effect of Boehmite Nanoparticles on the Structural, Corrosion, and Diffusion Properties of Micro-arc Biocoatings. *Inorganic Materials: Applied Research*, 2021, vol. 12, No. 3, pp. 691–699. DOI: 10.1134/S2075113321030072.
11. Chebodaeva V., Sedelnikova M., Bazhanova V., Lerner M., Pervikov A., Sharkeev Yu. Influence of Metal Based Nanoparticles on Properties of Micro-arc Calcium Phosphate Coatings. *AIP Conference Proceedings*, 2019, vol. 2167, pp. 020049-1–020049-4. DOI: 10.1063/1.5131916.
12. Lozhkomoev A.S., Pervikov A.V., Chumaevsky A.V., Dvilis E.S., Paygin V.D., Khasanov O.L., Lerner M.I. Fabrication of Fe-Cu composites from electroexplosive bimetallic nanoparticles by spark plasma sintering. *Vacuum*, 2019, vol. 170, pp. 108980. DOI: 10.1016/j.vacuum.2019.108980.
13. Mueller P.P., May T., Perz A., Hauser H., Peuster M. Control of smooth muscle cell proliferation by ferrous iron. *Biomaterials*, 2006, 27, pp. 2193–2200. DOI: 10.1016/j.biomaterials.2005.10.042.
14. Lozhkomoev A.S., Pervikov A.V., Chumaevsky A.V., Dvilis E.S., Paygin V.D., Khasanov O.L., Lerner M.I. Fabrication of Fe-Cu composites from electroexplosive bimetallic nanoparticles by spark plasma sintering. *Vacuum*, 2019, vol. 170, pp. 108980. DOI: 10.1016/j.vacuum.2019.108980.

Подана в журнал: 15.06.2021
УДК 621.794.61
DOI: 10.17804/2410-9908.2021.4.015-022

ЭЛЕМЕНТНЫЙ СОСТАВ КАЛЬЦИЙ-ФОСФАТНЫХ ПОКРЫТИЙ МОДИФИЦИРОВАННЫХ НАНОЧАСТИЦАМИ Fe-Cu

В. В. Чебодаева^{а)*}, М. Б. Седельникова^{б)}, О. В. Бакина^{в)}, Ю. П. Шаркеев^{г)}

*Институт физики прочности и материаловедения (ИФПМ) СО РАН,
д. 8/3, пр. Академический, 634021, г. Томск, Российская Федерация*

^{а)}  <http://orcid.org/0000-0002-1980-3941>  vtina5@mail.ru;
^{б)}  <http://orcid.org/0000-0002-5741-6053>  smasha5@yandex.ru;
^{в)}  <http://orcid.org/0000-0002-8650-6939>  ovbakina@ispms.tsc.ru;
^{г)}  <http://orcid.org/0000-0001-5037-245X>  sharkeev@ispms.tsc.ru

*Ответственный автор. Электронная почта: vtina5@mail.ru
Адрес для переписки: пр. Академический, д. 8/3, г. Томск, 634021, Российская Федерация
Тел.: +7 (382) 286-69-11

Объект исследования – кальций-фосфатные покрытия с введенными в их состав наночастицами Fe-Cu. Проведено исследование элементного состава и распределения элементов кальций-фосфатных (КФ) покрытий, нанесенных методом микродугового окисления (МДО). Установлено, что количественное содержание и распределение элементов Ca, P, O, Ti, Fe и Cu в поверхностном слое покрытия существенно зависит от введенных дополнительных компонентов электролита. После модификации наночастицами Fe-Cu содержание Ca увеличивается от 4,5 до 6,7 ат. %, а количество P и Ti увеличивается от 11,7 до 22,3 ат. % и от 7,9 до 15,8 ат. % соответственно. При этом концентрация кислорода уменьшается от 75,9 до 55,0 ат. %. Показано, что такое поведение элементов в покрытии определяется участием ионов металлов Fe^{3+} и Cu^{2+} во время осаждения покрытия, способствующих интенсификации процессов МДО.

Ключевые слова: кальций-фосфатные покрытия, гидроксипатит, нанокompозитные частицы Fe-Cu, наночастицы, микродуговое окисление.

1. Введение

В настоящее время модификация поверхности биоматериалов для придания им новых физико-химических свойств является перспективным направлением в материаловедении [1–3]. Наиболее важными при взаимодействии биоматериала с биологическими тканями являются свойства его поверхности. Для придания биоактивных свойств металлическим имплантатам из биоинертных сплавов часто наносят на их поверхность кальций-фосфатные (КФ) покрытия [4, 5]. Для формирования таких покрытий перспективным является метод микродугового окисления (МДО), позволяющий наносить на поверхность биоинертных металлов и сплавов покрытия с необходимыми пористостью, химическим и фазовым составами [4–9]. Структура полученных покрытий с открытыми порами позволяет вводить в их состав модифицирующие добавки для улучшения антибактериальных и биоактивных свойств.

Введение дополнительных компонентов в состав покрытий, таких как наночастицы оксигидроксида алюминия $AlO(OH)$ или оксида цинка ZnO , способствует улучшению функциональных свойств модифицируемых материалов [10–12]. Применение наночастиц Fe-Cu с ограниченной смешиваемостью для модификации КФ-покрытия будет способствовать повышению биомеханических, антибактериальных и биоактивных свойств покрытий [13, 4]. Такой недостаток покрытий, как их низкая адгезия к титановой подложке, может быть

устранен путем добавления в состав электролита Fe для улучшения прочностных и адгезионных свойств покрытия. В то же время введение в покрытие Cu в составе наночастиц Fe-Cu будет улучшать его антибактериальные свойства. Известно, что ионы железа и меди являются важным составляющим группы ферментов, катализирующих различные физиологические процессы, таких как связывание кислорода, синтез ДНК и перенос электронов в дыхательной цепи [13, 14].

Цель работы – исследование элементного состава микродуговых кальций-фосфатных покрытий, модифицированных наночастицами Fe-Cu.

2. Материал и методика

В качестве экспериментальных образцов использовали пластинки с размерами $10 \times 10 \times 1$ мм³ из титана марки BT1-0. Образцы обрабатывали шлифовальной бумагой с последовательным уменьшением зернистости (P180, P400, P600) на шлифовально-полировальном станке Tegra System (Struers, Denmark, ЦКП «Нанотех» ИФПМ СО РАН) при скорости вращения диска 300 об./мин. Последний этап заключался в очистке от загрязнений с применением ультразвукового воздействия (ультразвуковая мойка Elmasonic 515H), в дистиллированной воде (10 мин) на первом этапе, а затем в этиловом спирте (10 мин).

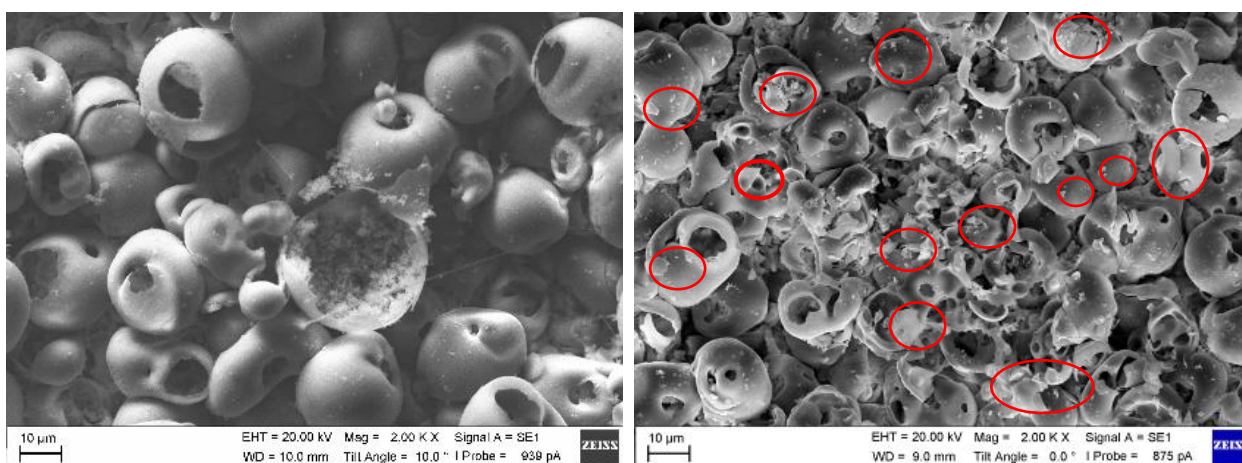
КФ-покрытие наносили на поверхность титановой подложки методом МДО на установке «MicroArc-3.0» (Лаборатория физики наноструктурных биокomпозитов ИФПМ СО РАН) в анодном потенциостатическом режиме в электролите, в состав которого входили водный 30 %-й раствор ортофосфорной кислоты H_3PO_4 , карбонат кальция $CaCO_3$, гидроксипатит $Ca_{10}(PO_4)_6(OH)_2$ и нанокомпозитный порошок Fe-Cu [3]. Нанокомпозитный порошок Fe-Cu с соотношением Fe/Cu, равным 46/54 мас. % был получен методом совместного электрического взрыва проволок железа и меди [13]. Для формирования покрытий методом МДО использовали следующие параметры: длительность импульса – 100 мкс; частота следования импульсов – 50 Гц; величина импульсного напряжения – 250 В; длительность процесса – 10 мин. Порошок ГА стехиометрического состава был получен методом механохимического синтеза (МХС) в Институте химии твердого тела и механохимии СО РАН (ИХТТМ СО РАН, г. Новосибирск).

Морфологию и элементный состав КФ-покрытий исследовали методом растровой электронной микроскопии (РЭМ) на микроскопе «LEO EVO-50» с приставкой «INCA-350» для энергодисперсионного микроанализа (ЦКП ИФПМ СО РАН «Нанотех», г. Томск).

3. Результаты и их обсуждение

На рис. 1 представлены результаты исследования поверхности КФ-покрытий методом РЭМ. Результаты проведенного исследования показали, что КФ-покрытия обладают развитой поверхностью и представлены сферическими структурными элементами с порами (рис. 1 а). Также на поверхности покрытий присутствуют поры, локализованные в углублениях между сфероидальными элементами. Исследования покрытий с помощью энергодисперсионного микроанализа показали, что в состав таких покрытий входят кальций (4,5 ат. %), фосфор (11,7 ат. %), кислород (75,9 ат. %) и титан (7,9 ат. %).

Введение в электролит нанокомпозитных частиц Fe-Cu способствует усилению интенсивности плазмохимических реакций в процессе нанесения МДО-покрытий и образованию на их поверхности разрушенных сферических образований и осколков. Поверхность КФ-покрытий, нанесенных на титановую подложку в электролите с наночастицами Fe-Cu, также представлена сферическими элементами и порами (рис. 1 б). Добавление нанокомпозитных частиц Fe-Cu в электролит приводит к формированию на поверхности сферических структурных элементов и между ними осколков со средним размером 1 мкм (рис. 1 б, выделены красными эллипсами).



a

б

Рис. 1. Типичные РЭМ-изображения немодифицированных КФ-покрытий (*a*) и покрытий с наночастицами Fe-Cu (*б*), сформированных методом МДО при напряжении процесса 250 В

Исследование элементного состава покрытий методом энергодисперсионного микроанализа, показало, что в модифицированных КФ-покрытиях присутствуют следующие элементы: кальций (6,7 ат. %); фосфор (22,3 ат. %); кислород (55,0 ат. %) и титан (15,8 ат. %) (таблица). При этом в КФ-покрытиях, модифицированных нанокompозитными частицами Fe-Cu, содержание кальция увеличивается от 4,5 до 6,7 ат. %. Количество фосфора и титана после введения наночастиц увеличивается от 11,7 до 22,3 ат. % и от 7,9 до 15,8 ат. % соответственно. Концентрация кислорода в покрытии, напротив, уменьшается от 75,9 до 55,0 ат. %.

Элементный состав немодифицированных КФ-покрытий и покрытий, модифицированных наночастицами Fe-Cu

Образец покрытий	Химические элементы, ат. %					
	O	Ca	P	Ti	Fe	Cu
КФ-покрытие	75,9	4,5	11,7	7,9	—	—
КФ-покрытие, модифицированное наночастицами Fe-Cu	55,0	6,7	22,3	15,8	0,1	0,1

На рис. 2 представлены РЭМ-изображения немодифицированных КФ-покрытий, покрытий с наночастицами Fe-Cu (рис. 2 *a*, *д*) и карты распределения элементов (Ca, P, O, Ti, Fe и Cu) по их поверхности (рис. 2 *б-г*, *е-к*). Покрытия, сформированные при напряжении процесса МДО 250 В, характеризуются однородным распределением фосфора и кислорода по их поверхности (рис. 2 *a*). Повышенная концентрация кальция сосредоточена в разрушенных сферах со скоплением частиц «чешуйчатой» формы размером меньше 1 мкм (рис. 2 *б*, частицы выделены эллипсами).

КФ-покрытия, модифицированные наночастицами Fe-Cu, также как и немодифицированные характеризуются однородным распределением фосфора и кислорода по поверхности (рис. 2 *ж*, *з*). Кроме того, кальций концентрируется в местах разрушенных сфер с более мелкими образованиями (рис. 2 *е*, выделены эллипсами). Модифицирующие элементы, в составе нанокompозитных частиц Fe-Cu распределены по покрытию однородно.

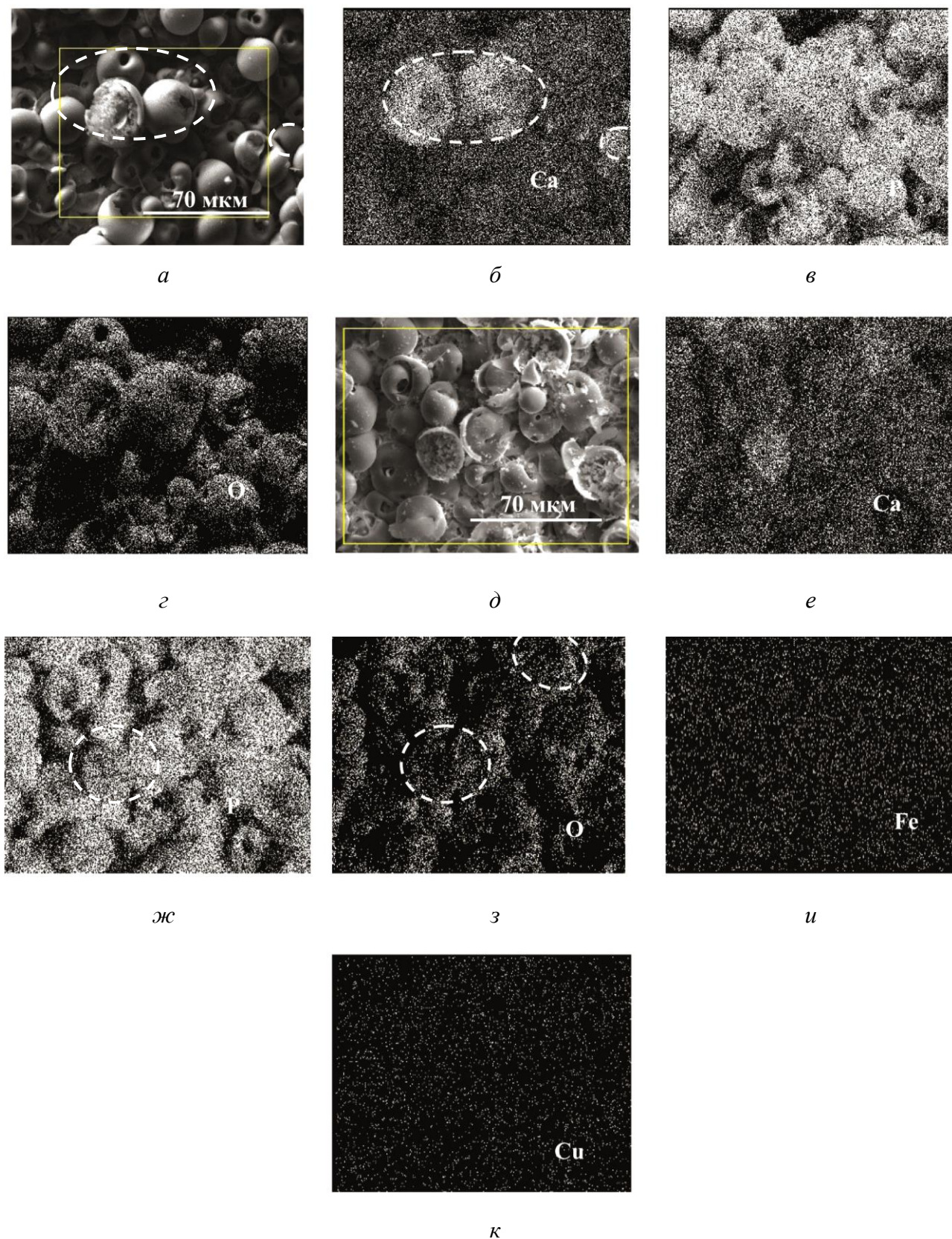


Рис. 2. Типичные РЭМ-изображения (а, д) и карты распределения элементов покрытий, сформированных методом МДО при напряжении 250 В: (а–г) – КФ-покрытия без наночастиц, (д–к) – КФ-покрытия с добавлением Fe-Cu

4 Заключение

В работе представлено исследование элементного состава и распределения элементов на поверхности кальций-фосфатных покрытий, сформированных при напряжении процесса МДО 250 В в электролите с добавлением наночастиц Fe-Cu. Кальций концентрируется в сферах покрытия с частицами «чешуйчатой» формы. Остальные элементы покрытия распределены однородно. Показано, что модификация покрытий наночастицами Fe-Cu способствует повышению содержания кальция, фосфора и титана. При этом количество кислорода уменьшается от 75,9 до 55,0 ат. %. Данный результат определяется участием ионов металлов Fe^{3+} и Cu^{2+} во время осаждения покрытия, способствующих интенсификации процессов МДО.

Благодарность

Авторы выражают благодарность д.х.н. М.В. Чайкиной, к.ф.-м.н. лаборатории интеркалляционных и механохимических реакций ИХТТМ СО РАН за подготовку стехиометрического гидроксипатита и А.И. Толмачеву, сотруднику лаборатории наноструктурных биокмполитов ИФПМ СО РАН, за помощь в подготовке титановых пластин.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, проект FWRW-2021-0007.

Литература

1. Биокмполиты на основе кальцийфосфатных покрытий, наноструктурных и ультрамелкозернистых биоинертных металлов, их биосовместимость и биодеградация / Ю. П. Шаркеев, С. Г. Псахье, Е. В. Легостаева, А. Г. Князева, А. Ю. Смолин, А. Ю. Ерошенко и др. – Томск : Издательский Дом Томского государственного университета, 2014. – 596 с.
2. Materials evolution of bone plates for internal fixation of bone fractures: A review / J. Li, L. Qin, K. Yang, Z. Ma, Y. Wang, L. Cheng, D. Zhao // Journal of Materials Science & Technology. – 2020. – Vol. 36. – P. 190–208. – DOI: 10.1016/j.jmst.2019.07.024.
3. Composite polymer-bioceramic scaffolds with drug delivery capability for bone tissue engineering / V. Mourico, J. P. Cattalini, J. A. Roether, P. Dubey, I. Roy, A. R. Boccaccini // Expert Opinion on Drug Delivery. – 2013. – Vol. 10 (10). – P. 1353–1365. – DOI: 10.1517/17425247.2013.808183.
4. Structural, morphological and adhesive properties of calcium phosphate coatings formed on magnesium alloy by micro-arc oxidation method in electrolyte containing dispersed particles / M. B. Sedelnikova, A. V. Ugodchikova, P. V. Uvarin, V. V. Chebodaeva, T. V. Tolkacheva, D. Schmidt, Yu. P. Sharkeev // Russian Physics Journal. – 2021. – DOI: 10.1007/s11182-021-02398-z.
5. Surface modification of $\text{Mg}_{0.8}\text{Ca}$ alloy via wollastonite micro-arc coatings: Significant improvement in corrosion resistance / M. B. Sedelnikova, A. V. Ugodchikova, T. V. Tolkacheva, V. V. Chebodaeva, I. A. Cluklhov, M. A. Khimich, O. V. Bakina, M. I. Lerner, V. S. Egorkin, J. Schmidt, Y. P. Sharkeev // Metals. – 2021. – Vol. 11 (5). – 754. – DOI: 10.3390/met11050754.
6. Influence of electrolyte composition on microstructure, adhesion and bioactivity of micro-arc oxidation coatings produced on biomedical Ti6Al7Nb alloy / J. Karbowniczek, F. Muhaffel, G. Cempura, H. Cimenoglu, A. Czyrska-Filemonowicz // Surface and Coatings Technology. – 2017. – Vol. 321. – P. 97–107. – DOI: 10.1016/j.surfcoat.2017.04.031.
7. Introduction to plasma electrolytic oxidation—an overview of the process and applications / F. Simchen, M. Sieber, A. Kopp, T. Lampke // Coatings. – 2020. – Vol. 628 (10). – DOI: 10.3390/coatings10070628.
8. Dorozhkin S. V. Calcium orthophosphate deposits: Preparation, properties and biomedical applications // Materials Science and Engineering C. – 2015. – Vol. 55. – P. 272–326. – DOI: 10.1016/j.msec.2015.05.033.

9. Influence of current density and electrolyte concentration on DC PEO titania coatings / R. H. U. Khan, A. L. Yerokhin, X. Li, H. Dong, A. Matthews // *Surface Engineering*. – 2014. – Vol. 30 (2). – P. 102–108. – DOI: 10.1179/1743294413Y.0000000225.
10. Effect of Boehmite Nanoparticles on the Structural, Corrosion, and Diffusion Properties of Microarc Biocoatings / V. V. Chebodaeva, N. N. Nazarenko, M. B. Sedelnikova, S. V. Gnedenkov, V. S. Egorkin, S. L. Sinebryukhov, and Yu. P. Sharkeev // *Inorganic Materials: Applied Research*. – 2021. – Vol. 12, No. 3. – P. 691–699. – DOI: 10.1134/S2075113321030072.
11. Influence of Metal Based Nanoparticles on Properties of Micro-arc Calcium Phosphate Coatings / V. Chebodaeva, M. Sedelnikova, V. Bazhanova, M. Lerner, A. Pervikov, Yu. Sharkeev // *AIP Conference proceedings* – 2019. – Vol. 2167. – P. 020049-1–020049-4. – DOI: 10.1063/1.5131916.
12. Fabrication of Fe-Cu composites from electroexplosive bimetallic nanoparticles by spark plasma sintering / A. S. Lozhkomoev, A. V. Pervikov, A. V. Chumaevsky, E. S. Dvilis, V. D. Paygin, O. L. Khasanov, M. I. Lerner // *Vacuum*. – 2019. – Vol. 170. – P. 108980. – DOI: 10.1016/j.vacuum.2019.108980.
13. Control of smooth muscle cell proliferation by ferrous iron / P. P. Mueller, T. May, A. Perz, H. Hauser, M. Peuster // *Biomaterials*. – 2006. – Vol. 27. – P. 2193–2200. – DOI: 10.1016/j.biomaterials.2005.10.042.
14. Fabrication of Fe-Cu composites from electroexplosive bimetallic nanoparticles by spark plasma sintering / A. S. Lozhkomoev, A. V. Pervikov, A. V. Chumaevsky, E. S. Dvilis, V. D. Paygin, O. L. Khasanov, M. I. Lerner // *Vacuum*. – 2019. – Vol. 170. – P. 108980. – DOI: 10.1016/j.vacuum.2019.108980.

Received: 06.06.2021

Revised: 06.08.2021

Accepted: 27.08.2021

DOI: 10.17804/2410-9908.2021.4.023-033

THE INFLUENCE OF 2 AT. % Si ADDITION ON THE ANNEALING OF RADIATION-INDUCED DEFECTS IN THE Fe-13Cr ALLOY

A. L. Nikolaev

*M.N. Miheev Institute of Metal Physics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,
18 S. Kovalevskoy St. Ekaterinburg, 620108, Russia*

 <https://orcid.org/0000-0002-0858-9820>  nikolaev@imp.uran.ru

*Corresponding author: E-mail: nikolaev@imp.uran.ru

Address for correspondence: 18, S. ul. Kovalevskoy, Ekaterinburg, 620108, Russian Federation
Tel.: +7 (343) 378 38 50

The paper presents data on electrical resistivity recovery in the Fe-13.4Cr and Fe13.6Cr-1.9Si alloys during isochronal annealing after 5 MeV electron irradiation below 77 K. Long-range migration of radiation-induced defects starts slightly above 200 K in Fe-13.4Cr. The silicon addition in Fe13.6Cr-1.9Si leads to immobilization of Frenkel pair defects thus making the peaks of the stages of the onset of long-range migration shift towards high temperatures up to 370 K and 420 K for self-interstitial atoms and vacancies, respectively. This finding confirms the data obtained earlier for Fe16Cr-Si alloys by means of positron annihilation technique (JNM 508(2018) 100–106) on trapping of radiation-induced defects on Si agglomerates (clusters consisting of several silicon atoms) formed during defect migration.

Keywords: Fe-Cr alloys, electron irradiation, radiation-induced defects, resistivity recovery, long-range defect migration, defect immobilization by Si agglomerates.

Acknowledgment

The research was carried out under the state assignment from the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (theme Function, No. AAAA-A19-119012990095-0). The author thanks Dr. D.A. Perminov for critically reading the manuscript.

References

1. Druzhkov A.P., Nikolaev A.L. Effect of Si concentration on formation of vacancy complexes in electron-irradiated Fe16Cr-Si alloys studied by positron annihilation. *J. Nucl. Mater.*, 2018, vol. 508, pp. 100–106. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2018.05.040.
2. Nikolaev A.L. Specificity of stage III in electron-irradiated Fe-Cr alloys. *Phil. Mag.*, 2007, vol. 87, No. 31, pp. 4847–4874. DOI: 10.1080/14786430701468977.
3. Nikolaev A.L. Difference approach to the analysis of resistivity recovery data for irradiated short-range ordered alloys. *Phil. Mag.*, 2009, vol. 89, No. 12, pp. 1017–1033. DOI: 10.1080/14786430902835651.
4. Nikolaev A.L. Recovery of electrical resistivity, short-range order formation and migration of defects in electron-irradiated Fe-4Cr alloy doped with carbon. *Phil. Mag.*, 2011, vol. 91, No. 6, pp. 879–898. DOI: 10.1080/14786435.2010.534740.
5. Druzhkov A.P., Nikolaev A.L. Effects of solute atoms on evolution of vacancy defects in electron-irradiated Fe-Cr-based alloys. *J. Nucl. Mater.*, 2011, vol. 408 (2), pp. 194–200. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2010.11.036.

6. Dimitrov C., Dimitrov O. Composition dependence of defect properties in electron-irradiated Fe-Cr-Ni solid solutions. *J. Phys. F: Met. Phys.*, 1984, vol. 14 (4), pp. 793–811. DOI: 10.1088/0305-4608/14/4/005.
7. Benkaddour A., Dimitrov C., Dimitrov O. Irradiation-induced defects in ferritic Fe-Cr alloys. *Mater. Sci. Forum*, 1987, vol. 15–18, pp. 1263–1268. DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.15-18.1263.
8. Kohl W., Scheffel R., Heidsiek H., Lucke K. Investigation of the kinetics of short-range order formation and quenched-in vacancy annihilation in Au-15 at. % Ag by resistivity measurements. *Acta Metall.*, 1983, vol. 31, No. 11, pp. 1895–1908. DOI: 10.1016/0001-6160(83)90135-9.
9. Vaessen P., Lengeler B., Shilling W. Recovery of electrical resistivity in electron-irradiated concentrated silver-zinc alloys. *Rad. Effects*, 1984, vol. 81 (3–4), pp. 277–292. DOI: 10.1080/00337578408206075.
10. Mirebeau I., Hennion M., Parette G. First measurement of short-range-order inversion as a function of concentration in a transition alloy. *Phys. Rev. Lett.*, 1984, vol. 53, pp. 687–690. DOI: 10.1103/PhysRevLett.53.687.
11. Apostolopoulos G., Lukianova V., Kotsina Z., Lagoyannis A., Mergia K., Harissopoulos S., Messoloras S. The influence of carbon on the resistivity recovery of proton irradiated Fe–11 at. % Cr alloys. *Nuclear Materials and Energy*, 2016, vol. 9, pp. 465–470. DOI: 10.1016/j.nme.2016.09.007.
12. Begoña Gómez-Ferrer. *Resistivity recovery in Fe and FeCr alloys*, SpringerBriefs in Applied Sciences and Technology, 2016.
13. Nikolaev A.L., Arbuzov V.L., Davletshin A.E. On the effect of impurities on resistivity recovery, short-range ordering, and defect migration in electron-irradiated concentrated Fe–Cr alloys. *J. Phys.: Condens. Matter.*, 1997, vol. 9, pp. 4385–4402. DOI: 10.1088/0953-8984/9/21/006.
14. Maury F., Lucasson A., Lucasson P., Moser P., Loreaux Y. Interstitial migration in dilute Fe-Si and Fe-Au alloys. *J. Phys. F: Met. Phys.*, 1985, vol. 15, iss. 7, pp. 1465–1484. DOI: 10.1088/0305-4608/15/7/007.
15. Takaki S., Fuss J., Kugler H., Dedek U., Schultz H. The resistivity recovery of high purity and carbon doped iron following low temperature electron irradiation. *Rad. Effects*, 1983, vol. 79 (3–4), pp. 87–122. DOI: 10.1080/00337578308207398.

Подана в журнал: 06.06.2021
УДК 539.12.043:620.192.63
DOI: 10.17804/2410-9908.2021.4.023-033

ВЛИЯНИЕ 2 АТ. % Si НА ОТЖИГ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В СПЛАВЕ Fe-13Cr

А. Л. Николаев

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт физики металлов им. М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук,
д. 18, ул. С. Ковалевской, Екатеринбург, Российская Федерация*

 <https://orcid.org/0000-0002-0858-9820>  nikolaev@imp.uran.ru

*Ответственный автор. Электронная почта: nikolaev@imp.uran.ru
Адрес для переписки: ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620108, Российская Федерация
Тел.: +7 (343) 378-38-50

Представлены данные по возврату остаточного электросопротивления в сплавах Fe-13,4Cr и Fe13,6Cr-1,9Si при изохронном отжиге после облучения электронами 5 МэВ ниже 77 К. В сплаве Fe-13,4Cr дальняя миграция радиационных дефектов начинается немного выше 200 К. В сплаве Fe13,6Cr-1,9Si добавка кремния приводит к иммобилизации дефектов Френкеля, в результате чего пики стадий начала дальней миграции собственных междоузельных и вакансий сдвигаются в сторону высоких температур до 370 К и 420 К соответственно. Эти данные подтверждают результаты, полученные ранее в сплавах Fe16Cr-Si методом аннигиляции позитронов (JNM 508(2018) 100–106), о захвате радиационных дефектов на кремниевых агрегатах (кластерах, состоящих из нескольких атомов кремния), формирующихся в процессе миграции дефектов.

Ключевые слова: сплавы Fe-Cr, облучение электронами, радиационные дефекты, возврат остаточного электросопротивления, дальняя миграция дефектов, иммобилизация дефектов агломератами из атомов Si.

1. Введение

Сплавы Fe-Cr являются основой для ферритных и ферритно-мартенситных сталей, используемых как конструкционный материал в атомных реакторах. Добавка 1,5–2 ат. % Si улучшает коррозионную стойкость этих сталей в свинцово-висмутовой эвтектике, которая рассматривается в качестве перспективного теплоносителя в реакторах на быстрых нейтронах. Поэтому важно понимать, как добавка кремния влияет на радиационную повреждаемость этих сталей. Первым шагом в этом направлении является понимание, как подобная добавка влияет на свойства радиационных дефектов.

Ранее [1] были представлены данные по взаимодействию вакансий с атомами Si в матрице Fe-16 ат. % Cr, легированной разным количеством кремния (0,2; 0,75 и 1,5 ат. %) после облучения электронами с энергией 5 МэВ вблизи 300 К, полученные методом аннигиляции позитронов, а именно, угловой корреляции аннигиляционного излучения.

Полученные результаты показывают, что изолированные атомы Si в разбавленном сплаве Fe16Cr-0,2Si не влияют на накопление и кластеризацию вакансий по сравнению с накоплением и кластеризацией в нелегированном сплаве Fe-16 Cr. Поэтому был сделан вывод, что они не захватывают мигрирующие вакансии и собственные междоузельные атомы (СМА) при 300 К.

В отличие от Fe-16Cr и Fe16Cr-0,2Si, где под облучением при комнатной температуре происходит накопление кластеров вакансий, в сплаве с наивысшей концентрацией Si,

(Fe16Cr-1,5Si), происходит накопление моновакансий. Данные по аннигиляции позитронов указывают, что эти моновакансии декорированы атомами кремния, т.е. рядом с каждой моновакансией находится кластер из нескольких атомов кремния. Был сделан вывод, что под облучением при концентрации кремния выше 0,2 ат. % происходит формирование кремниевых агрегатов (т. е. кластеров, состоящих из нескольких атомов Si)¹, которые захватывают и удерживают мигрирующие вакансии (т. е. осуществляют иммобилизацию вакансий) и не дают им объединяться в кластеры.

При ступенчатом изохронном отжиге после облучения в сплавах Fe16Cr-0,75Si и Fe16Cr-1,5Si наблюдали две стадии возврата: при 370 К и 420 К. Эти стадии были интерпретированы как диссоциация (освобождение с последующей миграцией) СМА (370 К) и вакансий (420 К), захваченных на кремниевых агрегатах в процессе облучения. Таким образом, согласно нашей интерпретации данных по аннигиляции позитронов при облучении вблизи комнатной температуры при концентрации 0,75 ат. % Si и выше благодаря взаимодействию радиационных дефектов с атомами Si происходит формирование кремниевых агрегатов. Эти агрегаты захватывают оба типа дефектов из пары Френкеля² (дефекты Френкеля – ДФ), мигрирующих при облучении вблизи 300 К, и удерживают их до достаточно высоких температур.

В нелегированных сплавах Fe-Cr дальняя миграция ДФ³ начинается (по крайней мере один из ДФ становится подвижным) при температурах 175–190 К [2–4]. Поэтому захват и удержание ДФ до высоких температур (370 и 420 К) при легировании примесью выглядят весьма необычно.

Чтобы получить независимое подтверждение этого факта с помощью другой методики, мы исследовали возврат остаточного электросопротивления (ОЭС) в сплавах Fe-13,4 ат. % Cr (Fe-13,4Cr) и Fe-13,6 ат. % Cr+1,9 ат. % Si (Fe13,6Cr-1,9Si), облученных электронами с энергией 5 МэВ при низких температурах. В отличие от [1], где исследованы модельные высокочистые сплавы, в настоящей работе для исследования использованы сплавы технической чистоты, которые по своему составу ближе к коммерческим сталям.

2. Методика и характеристики образцов

Оба сплава готовили дуговым переплавом порошков карбонильного железа, электролитического хрома и полупроводникового кремния в Институте металлургии им. Байкова (Москва) в алуновом тиглях слитками по 10 кг в атмосфере очищенного аргона. Затем слитки с промежуточными отжигами и травлением раскатывали в полосу толщиной 1 мм и в таком виде поставляли в Институт физики металлов. Здесь полосу в холодную прокатывали в фольгу толщиной 0,1–0,12 мм. Затем из фольги электроэрозионным способом вырезали четырехконтактные образцы с размерами измерительной части 4×1,5 мм², которые электролитическим травлением утончали до 0,05 мм и отжигали 4 ч в безмасляном вакууме 10⁻⁴ Па при ~1070 К. Стандартным химическим анализом определяли содержание примесей замещения: основная примесь Ni – 100 аргм. Содержание примесей внедрения определяли методом ядерного микроанализа: основная примесь С – 500 аргм. Более подробные детали в [5].

Образцы сплавов облучали электронами 5 МэВ при температуре ниже 77 К. После облучения образцы перегружали в измерительный криостат и подвергали изохронному ступенчатому отжигу (с постепенным повышением температуры на каждой ступени и измерением ОЭС между ступенями) с температурным шагом 7,5–10 К и выдержкой на каждой ступени 7,5–10 мин соответственно.

¹ Чтобы избежать путаницы с кластерами дефектов, мы используем термин «агрегат».

² При электронном облучении дефекты генерируются в виде пар Френкеля, состоящих из СМА и вакансии.

³ Дальней миграцией называется миграция дефектов на расстояния, разделяющие дефекты из различных пар Френкеля и выше.

По результатам строили и анализировали две зависимости от температуры отжига: возврат ОЭС $R = \Delta\rho(T)/\Delta\rho_{irr}$ и скорость возврата ОЭС $-dR/dT = -(\Delta\rho_{irr})^{-1}d(\Delta\rho(T))/dT$, где $\Delta\rho_{irr}$ и $\Delta\rho(T)$ являются начальными (после облучения) и текущими (после отжига при температуре T) приростами ОЭС. Зависимость скорости возврата ОЭС от температуры ($-dR(T)/dT$) также известна как спектр возврата ОЭС. Методики облучения, отжига образцов после облучения и измерения ОЭС подробно описаны в [2–4].

Для анализа поведения дефектов в концентрированных сплавах при отжиге после низкотемпературного облучения часто сравнивают кривые возврата ОЭС $R(T)$ в одинаковых образцах при различных начальных приростах ОЭС $\Delta\rho_{irr}$, или, другими словами, начальных концентрациях ДФ [3, 6]. Поэтому наши образцы также облучали до различных значений приростов ОЭС.

Три образца сплава Fe13,Cr-1,9Si облучали и отжигали в трех различных экспериментах. Два образца Fe-13,4Cr облучали до различных приростов ОЭС и отжигали в рамках одного эксперимента, как описано в [2]. Некоторые образцы Fe13,6Cr-1,9Si при переносе из устройства для облучения в измерительный криостат были перегреты до ~ 100 – 110 К. Поэтому для данных по возврату ОЭС ($R = \Delta\rho(T)/\Delta\rho_{irr}$) использовали нормировку на прирост ОЭС после отжига при 120 К, т. е. $\Delta\rho_{irr} = \Delta\rho_{120K}$. Использование такой нормировки является корректным, так как, по крайней мере до ~ 200 К, зависимости $R(T)$ в обоих сплавах практически не зависят от значений $\Delta\rho_{irr}$. Из сравнения с данными других авторов в близких сплавах [7] можно оценить, что $\Delta\rho_{120K}$ в обоих сплавах составляет ~ 55 % от прироста ОЭС после облучения при 21 К. Поэтому использование $\Delta\rho_{120K}$ вместо $\Delta\rho_{irr}$ не влияет на характер полученных зависимостей и ведет к простой перенормировке значений возврата и скорости возврата ОЭС.

Из величины прироста ОЭС $\Delta\rho_{irr}$ легко рассчитать исходную концентрацию пар Френкеля C_F^0 , если известен удельный вклад пар Френкеля в ОЭС ρ_F , $C_F^0 = \Delta\rho_{irr} / \rho_F$. Исходные концентрации ДФ при 120 К в образцах Fe-13,4Cr составляли 60 и 25 аррм, принимая $\rho_F = 75$ $\mu\text{Ohm cm/at. \%}$ [2]. Концентрации дефектов в сплаве Fe13,6Cr-1,9Si при 120 К могут быть оценены только грубо как 60, 45 и 38 аррм, так как удельный вклад ДФ в ОЭС в этом сплаве сильно отличается от известного значения [2] в нелегированных сплавах. Концентрации 60 аррм в обоих сплавах достигаются при облучении дозой $\sim 6,6 \times 10^{17}$ эл/см².

ОЭС сплава Fe13,6Cr-1,9Si ($\rho_0 = 55 \pm 3$ $\mu\text{Ohm cm}$) в 2,5 раза превышает ОЭС сплава Fe-13,4Cr ($\rho_0 = 22 \pm 1$ $\mu\text{Ohm cm}$)⁴. Одновременно ρ_F в сплаве Fe13,6Cr-1,9Si примерно вдвое меньше чем в сплаве Fe-13,4Cr. Вследствие этих факторов, а также более медленного отжига дефектов, погрешность определения скорости возврата ОЭС в сплаве Fe13,6Cr-1,9Si при температурах ниже ~ 300 К примерно на порядок превышает такую погрешность в сплаве Fe-13,4Cr и может достигать 30–40 %. При таких погрешностях полученные спектры являются недостоверными. Поэтому для образцов сплава Fe13,6Cr-1,9Si спектры возврата ОЭС приводятся только начиная с 290 К.

3. Результаты и обсуждение

Данные по возврату ОЭС представлены на рис. 1. Зависимости $R(T)$ для образцов одного и того же сплава, облученных до разных концентраций ДФ, совпадают при низких температурах и начинают расходиться выше ~ 200 К для сплава Fe-13,4Cr и ~ 300 К для Fe13,6Cr-1,9Si.

⁴ Вклад кремния в удельное ОЭС сплава Fe-16Cr составляет около 17 $\mu\text{Ohm cm/at. \%}$ [1].

Наблюдаемое расхождение кривых возврата ОЭС, полученных для различных исходных концентраций дефектов типично для систем, в которых при отжиге после низкотемпературного облучения происходит формирование ближнего порядка или, другими словами, ближнее упорядочение (БУ), ускоренное миграцией радиационных дефектов [6].

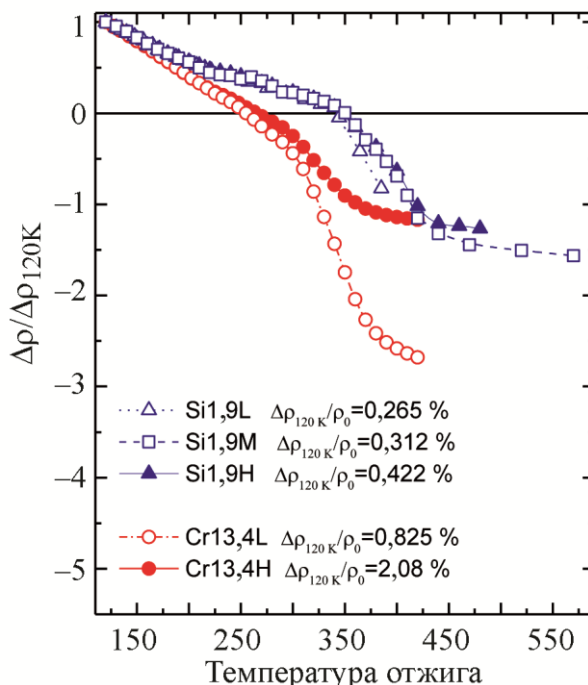


Рис. 1. Кривые возврата ОЭС образцов сплавов Fe-13,4Cr и Fe13,6Cr-1,9Si, облученных до разных значений приростов ОЭС. Погрешности измерений меньше размеров символов

В системах с БУ $R(T)$ состоит из двух частей, обусловленных присутствием дефектов и БУ, т. е. $R(T) = R_d(T) + R_{SRO}(T) = \Delta\rho_d(T)/\Delta\rho_{irr} + \Delta\rho_{SRO}(T)/\Delta\rho_{irr}$, где $\Delta\rho_d(T)$ и $\Delta\rho_{SRO}(T)$ являются текущими приростами ОЭС, обусловленными присутствием дефектов и БУ⁵, соответственно, после ступенчатого отжига вплоть до температуры T включительно. Известно [8], что $\Delta\rho_{SRO}$ является функцией числа прыжков дефектов и становится заметным, когда общее число прыжков всех дефектов (СМА или вакансий) N_d достигает величины порядка единицы на атом. Такое количество прыжков достигается только при дальней миграции дефектов. При взаимодействии дефектов из одной пары Френкеля, т.е. при рекомбинации близких пар и коррелированной миграции или захвате дефектов на ловушках, концентрация которых существенно превышает концентрацию дефектов (это наш случай с захватом дефектов на кремневых агрегатах), пробег дефектов (число прыжков) достаточно мал и вклад от БУ в ОЭС является пренебрежимо малым.

Физический смысл расхождения можно понять из следующих рассуждений [3]. Изменение в $\Delta\rho_{SRO}(T)$ при отжиге на каждой i -й ступени $(\Delta\rho_{SRO}(T_i) - \Delta\rho_{SRO}(T_{i-1}))$ достаточно мало и с хорошей точностью прямо пропорционально $N_d(T_i) - N_d(T_{i-1})$, т.е. числу прыжков дефектов при отжиге на этой ступени, где $N_d(T_i)$ общее число прыжков после отжига при T_i . При нормировке $\Delta\rho_{SRO}(T_i) - \Delta\rho_{SRO}(T_{i-1})$ на $\Delta\rho_{irr}$ (что пропорционально исходной концентра-

⁵ Величина $\Delta\rho_{SRO}(T)$ может быть как положительной, так и отрицательной в отличие от $\Delta\rho_d$, величина которого является положительной. Индекс SRO от английского Short-Range Order.

ции дефектов C_F^0) получаемая разность $\Delta R_{SRO}(T_i) = R_{SRO}(T_i) - R_{SRO}(T_{i-1})$ становится пропорциональной $[N_d(T_i) - N_d(T_{i-1})]/C_F^0$, т.е. среднему числу прыжков на данной ступени, приходящемуся на один исходный дефект. Так как в течение отжига сохраняется пропорциональность между текущей и исходной концентрациями дефектов, то величина $\Delta R_{SRO}(T_i)$ оказывается также пропорциональной среднему числу прыжков одного дефекта на данной ступени отжига, т. е. $\Delta R_{SRO}(T_i) \sim [n_d(T_i) - n_d(T_{i-1})]$.

Известно, что в процессе отжига после низкотемпературного облучения дефекты взаимодействуют преимущественно друг с другом. Поэтому средний пробег (среднее число прыжков) одного дефекта на каждой ступени отжига определяется вероятностью его встречи с другими дефектами, которая обратно пропорциональна как текущей, так и исходной концентрациям дефектов. Для наших рассуждений важна пропорциональность исходной концентрации дефектов, т. е. $\Delta R_{SRO}(T_i) \sim [n_d(T_i) - n_d(T_{i-1})] \sim 1/C_d^0$. Отсюда следует, что абсолютная величина $|\Delta R_{SRO}(T_i)|$ уменьшается с увеличением исходной концентрации дефектов. Если рассматривать два одинаковых образца с разной концентрацией дефектов – высокой (H) и низкой (L), то всегда справедливо соотношение $|\Delta R_{SRO}(T_i)|^L > |\Delta R_{SRO}(T_i)|^H$.

Величина $R_d(T)$ слабо меняется при относительно небольших (до ~ 4 раз) изменениях концентрации дефектов (относительные различия, как правило, не превышают $\sim 10\%$ во всем температурном диапазоне отжига дефектов). Поэтому зависимости $R_d(T)$ для одинаковых образцов с разной концентрацией дефектов отличаются слабо.

Отжиг дефектов в образцах с разной концентрацией дефектов до начала дальней миграции протекает идентично. $R(T)$ состоит из одной компоненты $R_d(T)$, так как $R_{SRO}(T) = 0$ и кривые $R^H(T)$ и $R^L(T)$ совпадают. Когда начинается дальняя миграция дефектов, то $R_{SRO}(T)$ становится отличным от нуля, но $R_{SRO}^H(T) \neq R_{SRO}^L(T)$.

Величина $R_{SRO}(T)$ после отжига на ступени при данной температуре T есть сумма всех $\Delta R_{SRO}(T_i)$ на предшествующих ступенях отжига, включая $\Delta R_{SRO}(T)$, т. е. $R_{SRO}(T) = \sum_{i=1}^{T_i=T} \Delta R_{SRO}(T_i)$ и на каждой ступени $|\Delta R_{SRO}^L(T_i)| > |\Delta R_{SRO}^H(T_i)|$. В результате $|R_{SRO}^L(T)| > |R_{SRO}^H(T)|$ и разница между $|R_{SRO}^L(T)|$ и $|R_{SRO}^H(T)|$ растет с увеличением температуры.

Другими словами, зависимости $R_{SRO}^H(T)$ и $R_{SRO}^L(T)$ расходятся с ростом температуры отжига. Это расхождение приводит к расхождению кривых $R^H(T)$ и $R^L(T)$, т.к. компоненты $R_d^L(T)$ и $R_d^H(T)$ различаются слабо. Это означает, что появление в возврате ОЭС компоненты $R_{SRO}(T)$, когда последняя становится отличной от нуля, ведет к расхождению кривых возврата $R^L(T)$ и $R^H(T)$.

Таким образом, расхождение кривых возврата указывает как на начало дальней миграции дефектов, так и на начало БУ, ускоренного дальней миграцией дефектов (рис. 1). Температура начала расхождения соответствует низкотемпературному краю стадии начала дальней миграции наиболее подвижных дефектов из пары Френкеля. В концентрированных сплавах это могут быть как СМА [6] (аналогично случаю чистых металлов), так и вакансии [2, 9] (в отличие от случая чистых металлов).

В сплавах Fe-Cr с концентрацией Cr выше 10 ат. % при термическом отжиге и отжиге после низкотемпературного облучения происходит БУ по типу ближнего расслоения, кото-

рое проявляется, соответственно, как уменьшение ОЭС [10] и падение $R(T)$ ниже нуля [7, 11–13]. На рис. 1 видно, что вскоре после начала расхождения кривых $R(T)$ последнее падает ниже нуля. Это указывает на протекание процесса БУ по типу расслоения в наших сплавах, которое является причиной расхождения кривых $R(T)$.

Наиболее точно температура начала расхождения кривых $R(T)$ определяется на спектрах возврата ОЭС (рис. 2). Она равна 202 К для сплава Fe-13,4Cr (рис. 2, вставка) и 330 К для сплава Fe13,6Cr-1,9Si. Эти температуры соответствуют низкотемпературному краю стадий начала дальней миграции, пики которых располагаются при 220 К для Fe-13,4Cr (рис. 2, вставка) и при 370 К для Fe13,6Cr-1,9Si. Ниже 330 К в сплаве Fe13,6Cr-1,9Si существуют только одиночные (не входящие в состав кластеров дефектов) вакансии и СМА. В сплаве Fe-13,4Cr, согласно [5], вакансии захватываются и удерживаются атомами углерода до 320 К, там, где на рис. 2 наблюдается пик большой стадии возврата ОЭС, связанной с освобождением вакансий. Из-за захвата на атомах углерода, концентрация которых намного превышает концентрации дефектов, миграция вакансий ниже 320 К не влияет на БУ в сплаве Fe-13,4Cr. Поэтому расхождение кривых $R(T)$ выше 202 К и стадия возврата ОЭС при 220 К обусловлены началом дальней миграции СМА (рис. 2, вставка).

Спектр сплава Fe13,6Cr-1,9Si сильно отличается от спектра Fe-13,4Cr (рис. 2). Дальняя миграция дефектов в Fe13,6Cr-1,9Si начинается при температурах, когда оба компонента пары Френкеля уже подвижны в Fe-13,4Cr. Это указывает на то, что температура начала дальней миграции ДФ в Fe13,6Cr-1,9Si определяется их взаимодействием только с атомами Si. Это логично, поскольку концентрация кремния превышает концентрацию углерода и других примесей, по крайней мере в сорок раз.

В чистом сплаве Fe-9Cr [2] пик стадии начала миграции вакансий и низкотемпературный край этой стадии наблюдаются при 205 К и 175 К соответственно. Поэтому дальняя миграция дефектов в отсутствие примеси углерода начинается при 175 К и сдвиг начала дальней миграции при легировании 2 ат. % Si до 330 К необходимо вести от 175 К.

Процент возврата в сплаве Fe13,6Cr-1,9Si после отжига при 330 К (к началу дальней миграции) составляет ~13 или ~7 %, если нормировка прироста ОЭС осуществляется после облучения при низкой температуре (4,2–21 К). Ранее [2] упоминалось, что процент возврата ОЭС к началу дальней миграции в нелегированном сплаве Fe-9Cr составляет 18 % (при нормировке при 21 К). Разница в процентах возврата к началу дальней миграции указывает на захват ДФ на атомах Si, который сопровождается потерей удельного вклада дефектов в ОЭС. Известно, что захват вакансий на атомах кремния в Fe [14] приводит к уменьшению вклада вакансий на 40 % от вклада пары Френкеля. В нашем случае уменьшение вклада составляет 60 %. Более высокий процент потери вклада в ОЭС может свидетельствовать о захвате вакансий на нескольких атомах кремния (кремниевых агломератах). Подобный эффект (увеличение потери удельного вклада дефектов в ОЭС) известен, когда вакансии в Fe перезахватываются с одного на два атома углерода [15].

В спектрах возврата ОЭС образцов сплава Fe13,6Cr-1,9Si в температурном интервале 330–480 К при 370 и 420 К наблюдаются два пика стадий возврата. Возврат ОЭС составляет 13 % при 330 К и падает до -127 и -146 % (существенно ниже исходного уровня) при 480 К. Отсюда следует, что более 90 % возврата ОЭС в данном температурном интервале обусловлено процессами БУ, ускоренного дальней миграцией дефектов, т. е. $R(T) \approx R_{SRO}(T)$.

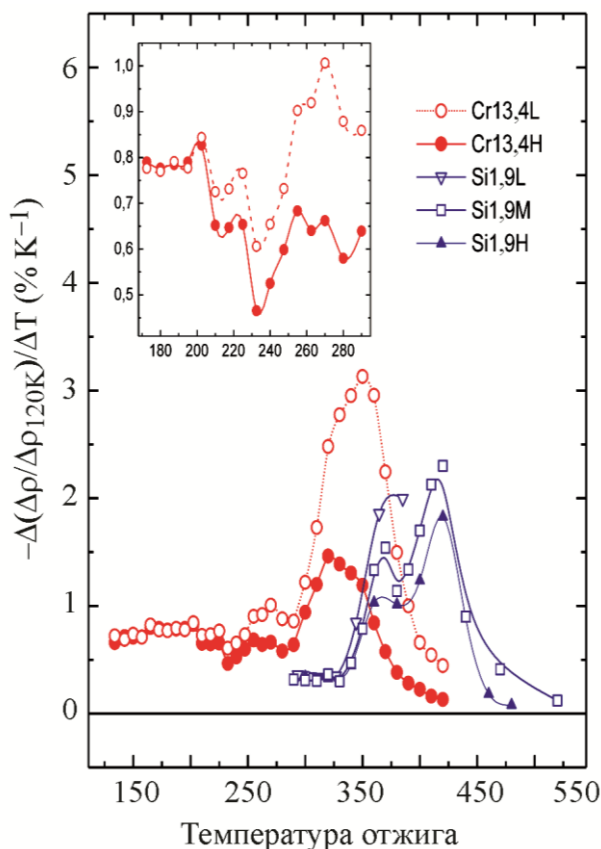


Рис. 2. Спектры возврата ОЭС для образцов сплавов Fe-Cr (рис. 1). Вставка: подробное изображение спектров возврата ОЭС для образцов сплава Fe-13,4Cr вблизи температуры начала расхождения кривых возврата. Погрешности измерения примерно соответствуют размерам символов. Для образцов сплава Fe-13,4Cr погрешности соответствуют размеру символов на вставке

Ранее [4] мы выделяли в возврате ОЭС $R(T)$ сплава Fe-4Cr часть, обусловленную БУ – $R_{SRO}(T)$. В этой части видны только две стадии, связанные с началом дальней миграции СМА и вакансий. Это вызвано тем, что другие процессы, происходящие при отжиге дефектов, слабо влияют на БУ. Поэтому две стадии возврата, наблюдаемые в $R_{SRO}(T)$ сплава Fe13.6Cr-1,9Si, напрямую связаны с началом дальней миграции СМА и вакансий.

Способность СМА ускорять БУ меньше, чем соответствующая способность вакансий. По этой причине в сплаве Fe-4Cr [4] пик стадии в $R_{SRO}(T)$, связанной с началом дальней миграции СМА, имеет меньшую амплитуду, чем соответствующий пик стадии, связанной с началом дальней миграции вакансий. По аналогии пик стадии с более низкой амплитудой при 370 К в Fe13,6Cr-1,9Si должен интерпретироваться как начало дальней миграции СМА, а более высокий пик при 420 К – как начало дальней миграции вакансий.

Таким образом, с учетом результатов и их анализа видно, что данные по возврату ОЭС в сплавах Fe-13,4Cr и Fe13,6Cr-1,9Si подтверждают данные, полученные методом аннигиляции позитронов в сплавах Fe16Cr-Si [1], о захвате СМА и вакансий и удержании их до достаточно высоких температур при наличии в сплаве 1,5–2 ат. % Si за счет формирования кремниевых агрегатов. С одной стороны, иммобилизация радиационных дефектов может усиливать их взаимную рекомбинацию и за счет этого уменьшать радиационную повреждаемость. С другой стороны, если агрегаты имеют тенденцию к заметному росту под облучением, то это может приводить к охрупчиванию. Формирование кремниевых агрегатов

не будет оказывать отрицательного влияния на свойства материала только в том случае, если агрегаты остаются достаточно малыми (2–3 атома).

4. Выводы

Легирование сплава Fe-Cr 2 ат. % Si сдвигает начало дальней миграции радиационных дефектов со 175 до 330 К.

Стадии начала дальней миграции СМА и вакансий в сплаве Fe_{13,6}Cr-1,9Si сдвигаются до 370 и 420 К по сравнению с 220 и 205 К в чистых сплавах Fe-Cr.

Благодарность

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Функция», № АААА-А19-119012990095-0). Автор выражает благодарность Д. А. Перминову за критические замечания при чтении работы.

Литература

1. Druzhkov A. P., Nikolaev A. L. Effect of Si concentration on formation of vacancy complexes in electron-irradiated Fe₁₆Cr-Si alloys studied by positron annihilation // J. Nucl. Mater. – 2018. – Vol. 508. – P. 100–106. – DOI: 10.1016/j.jnucmat.2018.05.040.
2. Nikolaev A. L. Specificity of stage III in electron-irradiated Fe-Cr alloys // Phil. Mag. – 2007. – Vol. 87, No. 31. – P. 4847–4874. – DOI: 10.1080/14786430701468977.
3. Nikolaev A. L. Difference approach to the analysis of resistivity recovery data for irradiated short-range ordered alloys // Phil. Mag. – 2009. – Vol. 89, No. 12. – P. 1017–1033. – DOI: 10.1080/14786430902835651.
4. Nikolaev A. L. Recovery of electrical resistivity, short-range order formation and migration of defects in electron-irradiated Fe-4Cr alloy doped with carbon // Phil. Mag. – 2011. – Vol. 91, No. 6. – P. 879–898. – DOI: 10.1080/14786435.2010.534740.
5. Druzhkov A. P., Nikolaev A. L. Effects of solute atoms on evolution of vacancy defects in electron-irradiated Fe-Cr-based alloys // J. Nucl. Mater. – 2011. – Vol. 408. – P. 194–200. – DOI: 10.1016/j.jnucmat.2010.11.036.
6. Dimitrov C., Dimitrov O. Composition dependence of defect properties in electron-irradiated Fe-Cr-Ni solid solutions // J. Phys. F: Met. Phys. – 1984. – Vol. 14. – P. 793–811. – DOI: 10.1088/0305-4608/14/4/005.
7. Benkaddour A., Dimitrov C., Dimitrov O. Irradiation-induced defects in ferritic Fe-Cr alloys // Mater. Sci. Forum. – 1987. – Vol. 15–18. – P. 1263–1268. – DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.15-18.1263.
8. Investigation of the kinetics of short-range order formation and quenched-in vacancy annihilation in Au-15 at. % Ag by resistivity measurements / W. Kohl, R. Scheffel., H. Heidsiek, K. Lucke // Acta metall. – 1983. – Vol. 31, No 11. – P. 1895–1908. – DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.15-18.1263.
9. Vaessen P., Lengeler B., Shilling W. Recovery of electrical resistivity in electron-irradiated concentrated silver-zinc alloys // Rad. Effects – 1984. – Vol. 81. – P. 277–292. – DOI: 10.1080/00337578408206075.
10. Mirebeau I., Hennion M., Parette G. First measurement of short-range-order inversion as a function of concentration in a transition alloy // Phys. Rev. Lett. – 1984. – Vol. 53. – P. 687–690. – DOI: 10.1103/PhysRevLett.53.687.
11. The influence of carbon on the resistivity recovery of proton irradiated Fe-11 at.% Cr alloys / G. Apostolopoulos, V. Lukianova, Z. Kotsina, A. Lagoyannis, K. Mergia, S. Harissopoulos, S. Messoloras // Nuclear Materials and Energy – 2016. – Vol. 9. – P. 465–470. – DOI: 10.1016/j.nme.2016.09.007.

12. Gómez-Ferrer Begoña. Resistivity recovery in Fe and FeCr alloys. – SpringerBriefs in Applied Sciences and Technology, 2016.
13. Nikolaev A. L., Arbuzov V. L., Davletshin A. E. On the effect of impurities on resistivity recovery, short-range ordering, and defect migration in electron-irradiated concentrated Fe–Cr alloys // J. Phys.: Condens. Matter. – 1997. – Vol. 9. – P. 4385–4402. – DOI: 10.1088/0953-8984/9/21/006.
14. Interstitial migration in dilute Fe-Si and Fe-Au alloys / F. Maury, A. Lucasson, P. Lucasson, P. Moser, Y. Loreaux // J. Phys. F: Met. Phys. – 1985. – Vol. 15. – P. 1465–1484. – DOI:10.1088/0305-4608/15/7/007.
15. The resistivity recovery of high purity and carbon doped iron following low temperature electron irradiation / S. Takaki, J. Fuss, H. Kugler, U. Dedek, H. Schultz // Rad. Effects – 1983. – Vol. 79. – P. 87–122. – DOI: 10.1080/00337578308207398.

Received: 02.07.2021

Revised: 22.08.2021

Accepted: 27.08.2021

DOI: 10.17804/2410-9908.2021.4.34-49

ANALYTICAL STUDY OF THE EKMAN ANGLE FOR THE BENARD–MARANGONI CONVECTIVE FLOW OF VISCOUS INCOMPRESSIBLE FLUID

A. V. Gorshkov^{a)} and E. Yu. Prosviryakov^{b)*}

*Institute of Engineering Science, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,
34 Komsomolskaya St., Ekaterinburg, 620049, Russian Federation*

^{a)}  <https://orcid.org/0000-0002-5741-3979>  alex55gor@mail.ru;

^{b)}  <https://orcid.org/0000-0002-2349-7801>  evgen_pros@mail.ru

*Corresponding author. E-mail: evgen_pros@mail.ru

Address for correspondence: 34 Komsomolskaya St., Ekaterinburg, 620049, Russian Federation
Tel.: +7 (343) 375 35 76; fax: 374 53 30

The paper considers the convective flow of a viscous incompressible fluid over a rotating surface. It studies the angle between the fluid velocity vector in the upper layer and the temperature gradient vector on the free surface. For the study, an analytical solution to the Oberbeck–Boussinesq equations is constructed, which describes the stratified Ekman flow taking into account two components of the Coriolis force. The temperature gradient and the conditions of Marangoni thermocapillary convection are set at the upper (free) boundary, and the condition of fluid adhesion is set on the lower (solid) boundary. The representation of velocities in the form of linear functions of horizontal coordinates is used. It is shown that, when the flow depth tends to infinity, the angle between the upper layer fluid velocity vector and the temperature gradient vector tends to $\pi/2$.

Keywords: analytical solution, thermocapillary convection, Ekman flow.

References

1. Pedlosky J. *Geophysical fluid dynamics*, Berlin, New York, Springer, 1987.
2. Gill A.E. *Atmosphere-Ocean Dynamics*, New York, Academic Press, 1982.
3. Ekman V.W. On the influence of the Earth's rotation on ocean-currents. *Ark. Mat. Astron. Fys.*, 1905, vol. 2, No. 11, pp. 1–52.
4. Aristov S.N., Knyazev D.V., Polyanin A.D. Exact solutions of the Navier-Stokes Equations with the linear dependence of velocity components on two space variables. *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, 2009, vol. 43, No. 5, pp. 642–662. DOI: 10.1134/S0040579509050066.
5. Burmasheva N.V., Prosviryakov E.Yu. Exact solution of Navier–Stokes equations describing spatially inhomogeneous flows of a rotating fluid. *Trudy Instituta Matematiki i Mekhaniki UrO RAN*, 2020, vol. 26, No. 2, pp. 79–87. (In Russian).
6. Burmasheva N.V., Prosviryakov E.Yu. A class of exact solutions for two-dimensional equations of geophysical hydrodynamics with two Coriolis parameters. *The Bulletin of Irkutsk State University. Series Mathematics*, 2020, vol. 32, pp. 33–48. DOI: 10.26516/1997-7670.2020.32.33. (In Russian).
7. Felzenbaum A.I. *Teoreticheskie osnovy i metody rascheta ustanovivshikhsya morskikh tekheniy* [Theoretical Foundations and Methods for Calculating Steady Sea Currents]. AN SSSR Publ., 1960, 127 p. (In Russian).

8. Dolgansky F.V. *Lektsii po geofizicheskoy gidrodinamike* [Lectures on Geophysical Hydrodynamics]. Moscow, IVM RAN Publ, 2006, 378 p. (In Russian).
9. Korotaev G.K., Mikhaylova E.N., Shapiro N.B. *Teoriya ekvatorialnykh protivotecheniy v Mirovom okeane* [Theory of Equatorial Countercurrents in the World Ocean]. Kiev, Nauk. Dumka Publ., 1986, 208 p. (In Russian).
10. Zyryanov V.N. *Teoriya ustanovivshchikhsya okeanicheskikh techeniy* [Theory of Steady Ocean Currents]. Leningrad, Gidrometeoizdat Publ., 1985. (In Russian).
11. Aristov S.N., Prosviryakov E.Yu. Aristov S.N., Prosviryakov E.Y. On laminar flows of planar free convection. *Rus. J. Nonlin. Dyn.*, 2013, vol. 9, No. 4, pp. 651–657. DOI: 10.20537/nd1304004. (In Russian).
12. Aristov S.N., Shvarts K.G. *Vikhrevye techeniya advektivnoy prirody vo vrashchayushchemsya sloe zhidkosti* [Vortical Flows of Advective Nature in a Rotating Fluid Layer]. Perm, Perm. Gos. Univ. Publ., 2006, 154 p. (In Russian).
13. Aristov S.N., Shvarts K.G. *Vikhrevye techeniya v tonkikh sloyakh zhidkosti* [Vortical Flows in Thin Fluid Layers]. Kirov, VyatGU Publ., 2011. (In Russian).
14. Aristov S.N., Shvarts K.G. Advective flow in a rotating liquid film. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 2016, vol. 57, No. 1, pp. 188–194. DOI: 10.1134/S0021894416010211.
15. Ingel L.Kh., Aristov S.N. The class of exact solutions of nonlinear problems on thermal circulation associated with volumetric heat release in the atmosphere. *Tr. In-ta Eksperim. Meteorol.*, 1996, No. 27 (162), pp. 142–157. (In Russian).
16. Gorshkov A.V., Prosviryakov E.Yu. Convective flow in the solid rotation of a viscous incompressible fluid. *AIP Conference Proceedings*, 2017, vol. 1915, 040020. DOI: 10.1063/1.5017368.
17. Gorshkov A.V., Prosviryakov E.Yu. Ekman Convective Layer Flow of a Viscous Incompressible Fluid. *Izvestiya, Atmospheric and Oceanic Physics*, 2018, vol. 54, No. 2, pp. 189–195. DOI: 10.1134/S0001433818020081.
18. Gorshkov A.V. Prosviryakov E.Yu. Analytical Study of the Ekman Angle for the Isothermal Flow of a Viscous Incompressible Fluid in View of the Navier Boundary Condition. *AIP Conference Proceedings*, 2020, vol. 2315, 020018. DOI: 10.1063/5.0036889.
19. Constantin A., Johnson R.S. Atmospheric Ekman flows with variable eddy viscosity. *Boundary-Layer Meteorology*, 2019, vol. 170, pp. 395–414. DOI: 10.1007/s10546-018-0404-0.
20. Shrira V.I., Almela R.B. Upper-ocean Ekman current dynamics: a new perspective. *Journal of Fluid Mechanics*, 2020, vol. 887, A24. DOI: 10.1017/jfm.2019.1059.
21. Fečkan M., Guan Y., O'Regan D., Wang J.R. Existence and uniqueness and first order approximation of solutions to atmospheric Ekman flows. *Monatshefte für Mathematik*, 2020, 193, pp. 623–636. DOI: 10.1007/s00605-020-01414-7.
22. Ortiz-Tarin J.L., Lee S., Flores O., Sarkar S. Global modes and large-scale structures in an Ekman boundary layer. *Journal of Physics: Conference Series*, 2020, vol. 1522, 012011. DOI: 10.1088/1742-6596/1522/1/012011.
23. Prosviryakov E.Y. New class of exact solutions of Navier–Stokes equations with exponential dependence of velocity on two spatial coordinates. *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, 2019, vol. 53, No. 1, pp. 107–114. DOI: 10.1134/S0040579518060088.
24. Aristov S.N., Prosviryakov E.Y. A new class of exact solutions for three-dimensional thermal diffusion equations. *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, 2016, vol. 50, No. 3, pp. 286–293. DOI: 10.1134/S0040579516030027.
25. Burmasheva N.V., Prosviryakov E.Yu. Isothermal layered flows of a viscous incompressible fluid with spatial acceleration in the case of three Coriolis parameters. *Diagnostics, Resource and*

Mechanics of materials and structures, 2020, iss. 3, pp. 29–46. DOI: 10.17804/2410-9908.2020.3.029-046. Available at: http://dream-journal.org/issues/2020-3/2020-3_291.html

26. Burmasheva N.V., Privalova V.V., Prosviryakov E.Yu. Layered Marangoni convection with the Navier slip condition. *SADHANA-ACADEMY PROCEEDINGS IN ENGINEERING SCIENCES*, 2021, vol. 46, iss. 1, No. 55. DOI: 10.1007/s12046-021-01585-5.

27. Ershkov Sergey V., Prosviryakov Evgeniy Yu., Burmasheva Natalya V., and Christianto Victor. Towards understanding the algorithms for solving the Navier–Stokes equations. *Fluid Dynamics Research*, 2021, vol. 53, No. 4, pp. 044501. DOI:10.1088/1873-7005/ac10f0.

Подана в журнал: 02.07.2021

УДК 517.958

DOI: 10.17804/2410-9908.2021.4.34-49

АНАЛИТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ УГЛА ЭКМАНА ДЛЯ КОНВЕКТИВНОГО ТЕЧЕНИЯ БЕНАРА-МАРАНГОНИ ВЯЗКОЙ НЕСЖИМАЕМОЙ ЖИДКОСТИ

А. В. Горшков^{а)}, Е. Ю. Просвирыков^{б)*}

*Институт машиноведения УрО РАН,
ул. Комсомольская, 34, г. Екатеринбург, Российская Федерация*

^{а)}  <https://orcid.org/0000-0002-5741-3979>  alex55gor@mail.ru;

^{б)}  <https://orcid.org/0000-0002-2349-7801>  evgen_pros@mail.ru

*Ответственный автор. Электронная почта: evgen_pros@mail.ru

Адрес для переписки: ул. Комсомольская, 34, г. Екатеринбург, Российская Федерация

Тел.: +7 (343) 375–35–76; факс: 374–53–30

В работе рассмотрено конвективное течение вязкой несжимаемой жидкости по вращающейся поверхности. Исследован угол между вектором скорости жидкости в верхнем слое и вектором градиента температуры на свободной поверхности. Для исследования построено аналитическое решение уравнений Обербека–Буссинеска, описывающее слоистое течение Экмана с учетом двух компонент силы Кориолиса. На верхней (свободной) границе задан градиент температуры и условия термокапиллярной конвекции Марангони. На нижней (твердой) границе задано условие прилипания жидкости. Использовано представление скоростей в виде линейных функций горизонтальных координат. Показано, что при стремлении глубины потока к бесконечности угол между вектором скорости жидкости в верхнем слое и вектором градиента температуры стремится к $\pi/2$.

Ключевые слова: аналитическое решение, термокапиллярная конвекция, течение Экмана.

1. Введение

При вращении вязкой жидкости возникает угол между вектором касательных напряжений и вектором скорости течения в верхнем слое. Существование этого угла обусловлено действием силы Кориолиса, генерирующей движение изначально покоящейся жидкости. В научной литературе угол между векторами касательных напряжений и скорости называется углом Экмана [1, 2]. Аналитическое исследование величины этого угла является важной задачей геофизической гидродинамики [1, 2]. В работе Экмана [3] рассмотрен простейший случай изобарического течения океана бесконечной глубины при задании на свободной границе касательных напряжений, описывающих трение воздуха о морскую воду. Напомним, что движение Экмана является изобарическим только в неинерциальной (вращающейся) системе координат, а в инерциальной системе координат давление описывается квадрикой второго порядка, которая является круговым параблоидом [4–6].

При выполнении прогностических и диагностических расчетов течений Мирового океана используется традиционное приближение ускорения Кориолиса, характеризующееся одним параметром вектора угловой скорости (первый параметр Кориолиса). Строго говоря, такой подход позволяет описывать движение жидкости только в высоких широтах, где можно пренебречь вторым параметром Кориолиса [7–10]. Как известно, данное приближение также применяют и в средних широтах, но с дополнительными ограничениями на характерные масштабы скоростей и других гидродинамических полей [10]. Обобщения сдвигового

течения Экмана и исследование его устойчивости опубликованы в статьях [4–6, 11–18] и монографиях [7–10].

В библиографических источниках [4–6, 11–18] отражены исследования краевых и начально-краевых задач геофизической гидродинамики для широкого класса граничных условий на обеих границах горизонтального вращающегося бесконечного слоя жидкости. В работе [18] исследуется угол Экмана для изотермического течения вязкой несжимаемой жидкости с учетом выполнения условия скольжения жидкости по твердой поверхности согласно закону Навье. Использование условия проскальзывания или условия идеального скольжения позволяет учесть неровность дна [19–22].

При исследовании конвективных крупномасштабных течений важную роль играет не только гравитационный механизм, но и термокапиллярный. Особенно важно изучать так называемый сложный механизм конвекции, который проявляется в суперпозиции различных факторов, генерирующих конвекцию. Классы точных решений для изотермических, конвективных и термодиффузионных течений в задачах гидродинамики вращающихся жидкостей анонсированы в научных статьях и библиографических обзорах [4–6, 14–17, 23–27]. При использовании семейств классов точных решений в данной работе исследуется сложная конвекция Бенара–Марангони вращающейся вязкой жидкости. Построено аналитическое выражение угла между вектором скорости и вектором градиента температуры на свободной поверхности. Градиент температуры на свободной поверхности создает касательные напряжения, вызывающие течение верхнего слоя жидкости (эффект Марангони). Исследования угла Экмана выполнены на основе нелинейных уравнений Навье–Стокса в приближении Обербека–Буссинеска, описывающих слоистые течения жидкости с наклонной осью вращения.

2. Постановка задачи

Крупномасштабное сдвиговое конвективное течение в бесконечно протяженном горизонтальном слое вращающейся вязкой несжимаемой жидкости описывается системой уравнений Навье–Стокса в приближении Обербека–Буссинеска. Система уравнений, записанная в безразмерных переменных с учетом $V_z = 0$, имеет вид [5, 6, 12, 14, 16, 17]:

$$\begin{aligned} \text{Gr} \left(V_x \frac{\partial V_x}{\partial x} + V_y \frac{\partial V_x}{\partial y} \right) - \frac{\sin \varphi}{\text{Ek}} V_y &= -\text{Gr} \frac{\partial P}{\partial x} + \Delta V_x; \\ \text{Gr} \left(V_x \frac{\partial V_y}{\partial x} + V_y \frac{\partial V_y}{\partial y} \right) + \frac{\sin \varphi}{\text{Ek}} V_x &= -\text{Gr} \frac{\partial P}{\partial y} + \Delta V_y; \\ \frac{\partial P}{\partial z} &= \frac{2\delta V_x}{\text{Gr Ek}} \cos \varphi + \frac{\delta}{\text{Gr}} T; \\ \text{Ra} \left(V_x \frac{\partial T}{\partial x} + V_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) &= \Delta T; \\ \frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial V_y}{\partial y} &= 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь V_x и V_y – безразмерные компоненты вектора скорости жидкости; P – давление, нормированное на удвоенную удельную кинетическую энергию ρV^2 ; безразмерные горизонтальные координаты x и y определяются характерным масштабом длины L , а поперечная координата

та z – толщиной h слоя жидкости; $\delta = h/L$ – отношение масштабов длины (относительная толщина потока); T – безразмерная температура; ν – кинематическая вязкость жидкости; β – коэффициент объемного расширения жидкости; g – ускорение свободного падения; Ω – угловая скорость; φ – угол наклона оси вращения к плоскости течения жидкости. Кроме того, для записи системы уравнений (1) использованы безразмерные комплексы: $Gr = g\beta\vartheta L^3/\nu^2$ – число Грасгофа, где ϑ – разность максимальной и минимальной температур; $Ra = Pr Gr$ – число Рэлея; $Pr = \nu/\chi$ – число Прандтля; $Ek = Ro/Re = \nu/(L^2\Omega)$ – число Экмана, где $Ro = V/(L\Omega)$ – число Россби; $Re = VL/\nu$ (V – характерный масштаб линейной скорости). Для удобства и краткости записи введен $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{\delta^2} \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ – трехмерный оператор Лапласа.

Использование бесконечного горизонтального слоя для изучения течения вращающейся жидкости означает, что предложенная математическая модель (1) описывает крупномасштабные течения. В этом случае можно пренебречь кривизной планеты и рассматривать движение жидкости в области, принадлежащей касательному пространству тела, имеющего конечное значение кривизны.

Для системы (1) зададим следующие граничные условия. На нижней поверхности слоя жидкости, задаваемой уравнением $z = 0$, температура определяется как линейная функция горизонтальных координат:

$$T|_{z=0} = A_0 + xA_1 + yA_2, \quad (2)$$

где A_0 – отсчетное значение фоновой температуры (можно принять равным нулю); A_1 и A_2 – постоянные. Также на нижней поверхности слоя жидкости задается условие прилипания

$$V_x|_{z=0} = 0, \quad V_y|_{z=0} = 0. \quad (3)$$

Верхняя свободная поверхность жидкости предполагается плоской и задается уравнением $z = 1$ поскольку эта безразмерная координата получена делением на толщину слоя. На ней задана температура в виде, аналогичном (2):

$$T|_{z=1} = B_0 + xB_1 + yB_2, \quad (4)$$

где B_0 – значение фоновой температуры; B_1 и B_2 – постоянные. Давление на верхней границе считаем постоянным, не зависящим от продольных координат:

$$P|_{z=1} = S, \quad (5)$$

где S – постоянная, которую можно принять за отсчетное значение и положить равной нулю.

На свободной поверхности действует термокапиллярный эффект Марангони–Гиббса. Граничное условие Марангони в безразмерных переменных примет вид:

$$\left. \frac{\partial V_x}{\partial z} \right|_{z=1} = -Mg \frac{\partial T}{\partial x}, \quad \left. \frac{\partial V_y}{\partial z} \right|_{z=1} = -Mg \frac{\partial T}{\partial y}, \quad (6)$$

где Mg – безразмерное число Марангони.

Анализ системы (1) показывает, что ее разрешимость возможна в простейшем полиномиальном классе решений, принадлежащем семейству Линя–Сидорова–Аристов [11–15, 24]:

$$\begin{aligned} V_x &= U(z); \quad V_y = V(z); \\ P &= P_0(z) + xP_1(z) + yP_2(z); \\ T &= T_0(z) + xT_1(z) + yT_2(z). \end{aligned} \quad (7)$$

После подстановки вида решения (7) в систему уравнений (1) получим разрешающую систему обыкновенных дифференциальных уравнений для функций $U, V, T_0, T_1, T_2, P_0, P_1, P_2$:

$$\begin{aligned} T_1'' &= 0; \quad T_2'' = 0; \\ P_1' &= -\frac{\delta}{Gr} T_1; \quad P_2' = -\frac{\delta}{Gr} T_2; \end{aligned} \quad (8)$$

$$U'' + \frac{\delta^2 \sin \varphi}{Ek} V = \delta^2 Gr P_1; \quad V'' - \frac{\delta^2 \sin \varphi}{Ek} U = \delta^2 Gr P_2; \quad (9)$$

$$\begin{aligned} T_0'' &= Ra \delta^2 (T_1 U + T_2 V); \\ P_{0T}' &= -\frac{\delta}{Gr} T_0 \cos \varphi; \quad P_{0U}' = -\frac{\delta}{Gr} \frac{U}{Ek} \cos \varphi; \\ P_0 &= P_{0T} + P_{0U}. \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь штрих обозначает дифференцирование по переменной z . Фоновое давление P_0 для удобства разделено на два слагаемых. Слагаемое P_{0U} определяется компонентой скорости U из системы уравнений (8) и (9), а слагаемое P_{0T} – фоновой температурой T_0 .

Система уравнений (8)–(10) может быть последовательно проинтегрирована в том порядке, в котором выписаны уравнения.

При использовании данного класса точного решения (7) для системы (1) второй параметр Кориолиса содержится только в уравнении для определения давления P_0 (10), а поле скоростей, определяемое уравнениями (9), является обобщением классического решения Экмана [6–11]. Из уравнения (10) следует, что при учете двух параметров Кориолиса слоистое течение жидкости не может быть изобарическим во вращающейся системе координат.

Граничные условия (2)–(6), записанные для системы (1), в соответствии с классом решений (7) преобразуются к следующим граничным условиям системы (8)–(10): на нижней границе заданы компоненты вектора градиента граничной температуры и отсчетное значение фоновой температуры, которое можно положить равным нулю. Заданы также условия прилипания жидкости к твердой поверхности:

$$\begin{aligned} T_1(0) &= A_1; \quad T_2(0) = A_2; \quad T_0(0) = A_0; \\ U(0) &= 0; \quad V(0) = 0. \end{aligned} \quad (11)$$

На верхней свободной поверхности заданы компоненты вектора градиента температуры, компоненты вектора градиента давления и условия Марангони:

$$T_1(1) = B_1; \quad T_2(1) = B_2; \quad T_0(1) = B_0; \quad (12)$$

$$U'(1) = -\delta Mg T_1(1); V'(1) = -\delta Mg T_2(1);$$

$$P_1(1) = 0; P_2(1) = 0; P_0(1) = 0.$$

Граничные условия (11) и (12) позволяют определить постоянные интегрирования общего решения системы дифференциальных уравнений (8)–(10).

3. Течение Экмана, характеризующееся двумя параметрами Кориолиса

При заданных граничных условиях (11) и (12) получились следующие точные полиномиальные решения системы уравнений (8), определяющие градиенты давления и температуры:

$$T_1 = A_1 + (B_1 - A_1)z;$$

$$T_2 = A_2 + (B_2 - A_2)z;$$

$$P_1 = -\frac{(B_1(1-z^2) + A_1(z-1)^2)\delta}{2Gr};$$

$$P_2 = -\frac{(B_2(1-z^2) + A_2(z-1)^2)\delta}{2Gr}.$$

Так как для дальнейших исследований вектор градиента температуры на твердой поверхности не существует, то будем без ограничения потери общности для простоты считать его равным нулю: $A_1 = 0; A_2 = 0$.

Система уравнений (9) является линейной неоднородной системой дифференциальных уравнений четвертого порядка. Уравнение собственных чисел соответствующей линейной однородной системы – алгебраическое уравнение 4-го порядка:

$$\lambda^4 + 4\left(\frac{\sin \varphi}{2Ek}\right)^2 = 0. \quad (13)$$

Собственные числа системы уравнений (9), являющиеся корнями уравнения (13), равны:

$$\lambda_1 = k(1+i); \lambda_2 = k(1-i);$$

$$\lambda_3 = k(-1+i); \lambda_4 = k(-1-i),$$

где для краткости обозначено $k = \sqrt{\frac{|\sin \varphi|}{2Ek}}$. Модуль $|\sin \varphi|$ взят с учетом того, что в южном полушарии для географической широты справедливо неравенство $\varphi < 0$, а в уравнение (13) $\sin \varphi$ входит с квадратом.

Общее решение системы неоднородных уравнений (9) имеет вид:

$$U = (c_1 \exp(k\delta z) + c_3 \exp(-k\delta z)) \cos(k\delta z) +$$

$$+ (c_2 \exp(k\delta z) + c_4 \exp(-k\delta z)) \sin(k\delta z) + \frac{B_1 - B_2 z^2 \delta^2 k^2}{4 k^4 \delta};$$

$$V = (c_4 \exp(-kz\delta) - c_2 \exp(k\delta z)) \cos(k\delta z) + \\ + (c_1 \exp(k\delta z) - c_3 \exp(-k\delta z)) \sin(k\delta z) + \frac{B_2 + B_1 z^2 \delta^2 k^2}{4k^4 \delta},$$

где c_1, c_2, c_3, c_4 – произвольные постоянные интегрирования, определяемые из граничных условий (11) и (12). Полное частное решение системы (9), удовлетворяющее заданным граничным условиям (11) и (12), слишком громоздко и здесь не приводится. По этой же причине не приводятся выражения фоновой температуры и давления.

При постоянной, независящей от горизонтальных координат температуре на твердой поверхности решение для скоростей можно записать в виде:

$$U = B_1 \left(\frac{1}{4k^4 \delta} + f_1(z) + \text{Mg} \varphi_1(z) \right) - B_2 \left(\frac{z^2 \delta}{4k^2} + \text{Mg} \varphi_2(z) - f_2(z) \right); \\ V = B_1 \left(\text{Mg} \varphi_2(z) + \frac{z^2 \delta}{4k^2} - f_2(z) \right) + B_2 \left(\text{Mg} \varphi_1(z) + \frac{1}{4k^4 \delta} + f_1(z) \right). \quad (14)$$

Здесь функции $f_1(z); f_2(z); \varphi_1(z); \varphi_2(z)$ имеют следующий вид:

$$\varphi_2(z) = [\cosh(k\delta(z+1)) \sin(k\delta(z-1)) + \cosh(k\delta(z-1)) \sin(k\delta(z+1)) + \\ + \sinh(k\delta(1+z)) \cos(k\delta(z-1)) - \sinh(k\delta(z-1)) \cos(k\delta(z+1))] \times \\ \times [2k\delta(\cosh(2k\delta) + \cos(2k\delta))]^{-1}; \\ \varphi_1(z) = [\sinh(k\delta(z+1)) \cos(k\delta(z-1)) + \sinh(k\delta(z-1)) \cos(k\delta(z+1)) + \\ + \cosh(k\delta(z-1)) \sin(k\delta(z-1)) + \cosh(k\delta(z-1)) \sin(k\delta(z+1))] \times \\ \times [2k\delta(\cosh(2k\delta) + \cos(2k\delta))]^{-1}; \\ f_1(z) = [-\cosh(k\delta z) \cos(k\delta(z-1)) - k\delta \sinh(k\delta(z+1)) \cos(k\delta(z-1)) - \\ - \cosh(k\delta(z-2)) \cos(k\delta z) - k\delta \sinh(k\delta(z-1)) \cos(k\delta(z+1)) + \\ + k\delta \cosh(k\delta(z+1)) \sin(k\delta(z-1)) + k\delta \cosh(k\delta(z-1)) \sin(k\delta(z+1))] \times \\ \times [4k^4 \delta (\cosh(2k\delta) + \cos(2k\delta))]; \\ f_2(z) = \sinh(k\delta z) \sin(k\delta(z-2)) - \sinh(k\delta(z-2)) \sin(k\delta z) - \\ - k\delta \sinh(k\delta(1+z)) \cos(k\delta(z-1)) + k\delta \sinh(k\delta(z-1)) \cos(k\delta(1+z)) - \\ - k\delta \cosh(k\delta(1+z)) \sin(k\delta(z-1)) - k\delta \cosh(k\delta(z-1)) \sin(k\delta(1+z))] \times \\ \times [4k^4 \delta (\cosh(2\delta k) + \cos(2\delta k))]^{-1}. \quad (15)$$

Поле скоростей (15) принадлежит классу тригонометрических квазиполиномов и далее будет исследовано.

4. Асимптотическое приближение скоростей

Рассмотрим конвективное течение при больших значениях относительной толщины потока δ . Будем считать, что произведение $k\delta$ достаточно велико и можно пренебречь слагаемыми, содержащими в качестве множителей экспоненты, показатель которых при всех значениях z из отрезка $(0,1)$ меньше нуля. Приведенное условие позволяет рассматривать не только течения жидкости в тонком слое (малые значения относительной толщины δ), но и очень медленные вращательные движения жидкости при толщинах, у которых значение δ больше единицы. Отметим, что при больших значениях параметра δ реализация условий, полученных ранее, возможна при медленном вращении жидкости (угловая скорость должна быть меньше, чем у планеты Земля).

Разделим числители и знаменатели выражений функций (15) на $\exp(4k\delta)$ и оставим слагаемые, содержащие в качестве множителей экспоненты, показатель которых хотя бы при одном значении z из отрезка $(0,1)$ обращается в ноль: $\exp(-k\delta z)$; $\exp(k\delta(z-1))$. Функции f_1 ; f_2 ; φ_1 ; φ_2 принимают вид:

$$\begin{aligned}\varphi_1 &= \exp(k\delta(z-1)) \frac{\sqrt{2} \sin(k\delta(z-1) + \pi/4)}{2 k \delta}; \\ \varphi_2 &= \exp(k\delta(z-1)) \frac{\sqrt{2} \sin(k\delta(z-1) - \pi/4)}{2 k \delta}; \\ f_1 &= \frac{-\sqrt{2} \exp(k\delta(z-1)) \sin(k\delta(z-1) + \pi/4)}{4 k^3} - \exp(-k\delta z) \frac{\cos(k\delta z)}{4 k^4 \delta}; \\ f_2 &= \frac{\sqrt{2} \exp(k\delta(z-1)) \sin(\pi/4 + k\delta(z-1))}{4 k^3} + \exp(-k\delta z) \frac{\sin(k\delta z)}{4 k^4 \delta}.\end{aligned}$$

Из полученных выражений следует, что при больших значениях параметра $k\delta$ (для геофизической гидродинамики $\delta < 1$) вторые слагаемые функций f_1 и f_2 экспоненциально затухают при стремлении координаты z к единице, т. е.

$$\begin{aligned}\lim_{\substack{z \rightarrow 1 \\ k\delta \rightarrow \infty}} \left(\frac{-\sqrt{2} \exp(k\delta(z-1)) \sin(k\delta(z-1) + \pi/4)}{4 k^3} - \exp(-k\delta z) \frac{\cos(k\delta z)}{4 k^4 \delta} \right) &= 0; \\ \lim_{\substack{z \rightarrow 1 \\ k\delta \rightarrow \infty}} \left(\frac{\sqrt{2} \exp(k\delta(z-1)) \sin(\pi/4 + k\delta(z-1))}{4 k^3} + \exp(-k\delta z) \frac{\sin(k\delta z)}{4 k^4 \delta} \right) &= 0.\end{aligned}$$

Иными словами, на свободной поверхности функции f_1 и f_2 практически не вносят вклада в описание течения в приповерхностном слое. Отметим, первые слагаемые функций f_1 и f_2 , как и функции φ_1 и φ_2 , на свободной поверхности ограничены, что говорит о их доминирующем вкладе во вращающийся поток жидкости.

На рис. 1 и 2 представлено наличие спиральных противотечений во вращающейся жидкости. Влияние гравитационной и термокапиллярной конвекции приводит к наличию

двух нулевых точек в потоке жидкости, что отличает от классического точного решения Экмана [3].

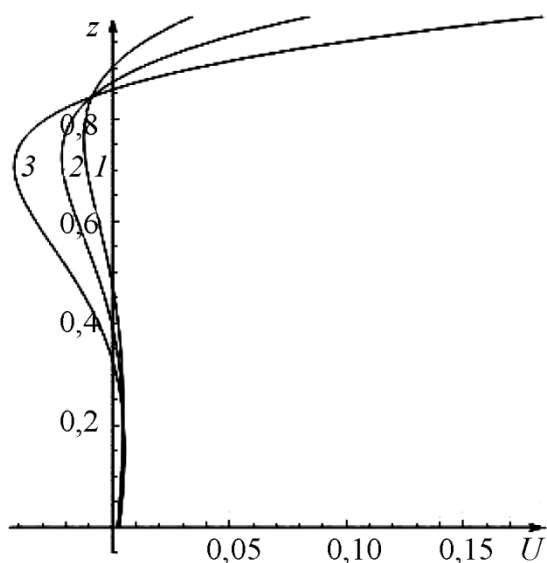


Рис. 1. Профили компоненты скорости U .
Кривые построены при использовании следующих значений параметров:
1 – $Mg = 0,05$; $B_1 = 10$; $B_2 = 0$; $k\delta = 5$;
2 – $Mg = 0,1$; $B_1 = 10$; $B_2 = 0$; $k\delta = 5$;
3 – $Mg = 0,2$; $B_1 = 10$; $B_2 = 0$; $k\delta = 5$

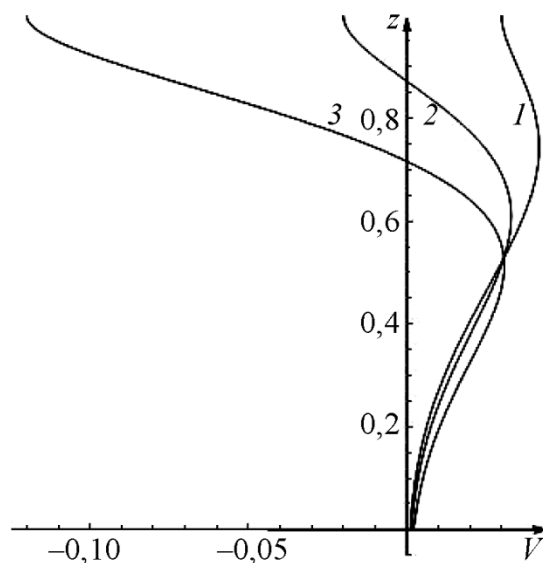


Рис. 2. Профили компоненты скорости V .
Кривые построены при использовании следующих значений параметров:
1 – $Mg = 0,05$; $B_1 = 10$; $B_2 = 0$; $k\delta = 5$;
2 – $Mg = 0,1$; $B_1 = 10$; $B_2 = 0$; $k\delta = 5$;
3 – $Mg = 0,2$; $B_1 = 10$; $B_2 = 0$; $k\delta = 5$

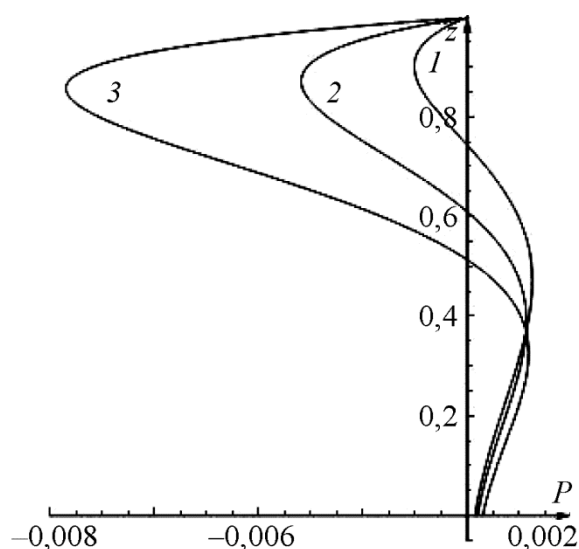


Рис. 3. Профиль слагаемого фонового давления P_{0U} . Кривые построены при использовании следующих значений параметров:
1 – $Mg = 0,05$; $B_1 = 10$; $B_2 = 0$; $k\delta = 5$;
2 – $Mg = 0,1$; $B_1 = 10$; $B_2 = 0$; $k\delta = 5$;
3 – $Mg = 0,2$; $B_1 = 10$; $B_2 = 0$; $k\delta = 5$

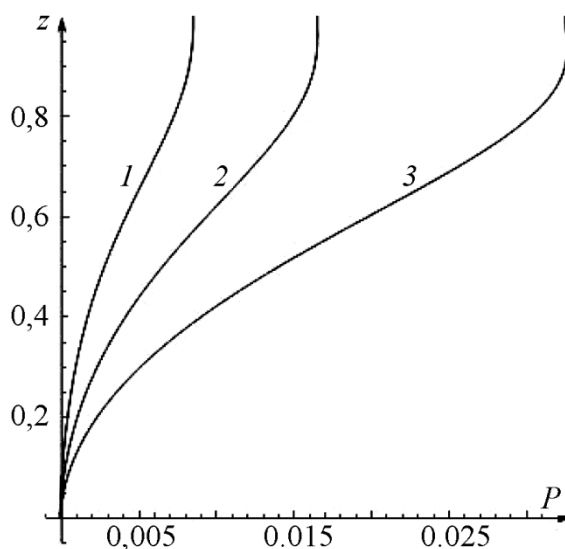


Рис. 4. Профиль слагаемого фонового давления P_{0T} . Кривые построены при использовании следующих значений параметров:
1 – $Mg = 0,05$; $B_1 = 10$; $B_2 = 0$; $k\delta = 5$;
2 – $Mg = 0,1$; $B_1 = 10$; $B_2 = 0$; $k\delta = 5$;
3 – $Mg = 0,2$; $B_1 = 10$; $B_2 = 0$; $k\delta = 5$

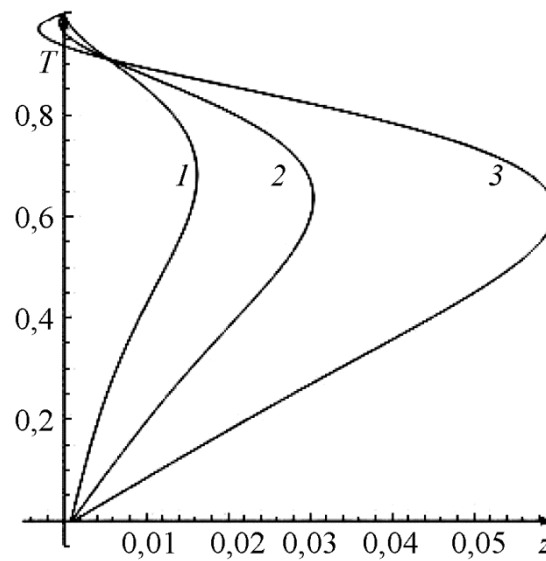


Рис. 5. Профили фоновой температуры T_0 . Кривые построены при использовании следующих значений параметров: 1 – $Mg = 0,05$; $B_1 = 10$; $B_2 = 0$; $k\delta = 5$; 2 – $Mg = 0,1$; $B_1 = 10$; $B_2 = 0$; $k\delta = 5$; 3 – $Mg = 0,2$; $B_1 = 10$; $B_2 = 0$; $k\delta = 5$

Существование застойных точек приводит к стратификации полей температуры и давления (рис. 3–5). Расслоение полей температуры и давления свидетельствует о возникновении термоклина и пикноклина в тонком слое жидкости. Регистрация пикноклина посредством анализа гидродинамических полей при постоянной фоновой плотности обусловлена выбором приближения Буссинеска и пренебрежением сжимаемостью жидкости из-за температурного вклада для зависимости плотности от структурных параметров жидкости.

5. Определение угла Экмана

Исследуем угол между вектором скорости потока жидкости в верхнем слое и осью абсцисс Ox . Тангенс угла γ между вектором скорости и осью Ox при конечной глубине имеет вид:

$$\operatorname{tg} \gamma(z) = \frac{B_1 \left(Mg \varphi_2(z) + \frac{z^2 \delta}{4k^2} - f_2(z) \right) + B_2 \left(Mg \varphi_1(z) + \frac{1}{4k^4 \delta} + f_1(z) \right)}{B_1 \left(Mg \varphi_1(z) + \frac{1}{4k^4 \delta} + f_1(z) \right) - B_2 \left(Mg \varphi_2(z) + \frac{z^2 \delta}{4k^2} - f_2(z) \right)}. \quad (16)$$

Введем угол γ_μ :

$$\operatorname{tg} \gamma_\mu = \frac{\frac{z^2 \delta}{4k^2} + Mg \varphi_2(z) - f_2(z)}{\frac{1}{4k^4 \delta} + Mg \varphi_1(z) + f_1(z)}. \quad (17)$$

Угол γ_B определим из условия $\operatorname{tg} \gamma_B = \frac{B_2}{B_1}$. Проведя элементарные преобразования выражения $\operatorname{tg} \gamma$ (16), получим:

$$\operatorname{tg} \gamma = \frac{\frac{Mg \varphi_2(z) + \frac{z^2 \delta}{4k^2} - f_2(z)}{Mg \varphi_1(z) + \frac{1}{4k^4 \delta} + f_1(z)} + \frac{B_2}{B_1}}{1 - \frac{B_2}{B_1} \frac{Mg \varphi_2(z) + \frac{z^2 \delta}{4k^2} - f_2(z)}{Mg \varphi_1(z) + \frac{1}{4k^4 \delta} + f_1(z)}} = \operatorname{tg}(\gamma_B + \gamma_\mu).$$

Таким образом, угол γ складывается из двух слагаемых – угла между вектором граничного градиента температуры ($B_1 \dot{B}_2$), осью Ox и угла, зависящего от относительной толщины слоя жидкости δ , глубины z , скорости вращения, определяемой параметром k и числом Марангони Mg .

Для определения угла между вектором скорости потока и осью Ox при большой глубине вычислим предел выражения:

$$\begin{aligned} \lim_{\delta \rightarrow \infty} \frac{B_1 \left(Mg \varphi_2(z) + \frac{z^2 \delta}{4k^2} - f_2(z) \right) + B_2 \left(Mg \varphi_1(z) + \frac{1}{4k^4 \delta} + f_1(z) \right)}{B_1 \left(Mg \varphi_1(z) + \frac{1}{4k^4 \delta} + f_1(z) \right) - B_2 \left(Mg \varphi_2(z) + \frac{z^2 \delta}{4k^2} - f_2(z) \right)} = \\ = \frac{B_1}{-B_2} = -\operatorname{ctg} \gamma_B = \operatorname{tg}(\gamma_B + \pi/2). \end{aligned}$$

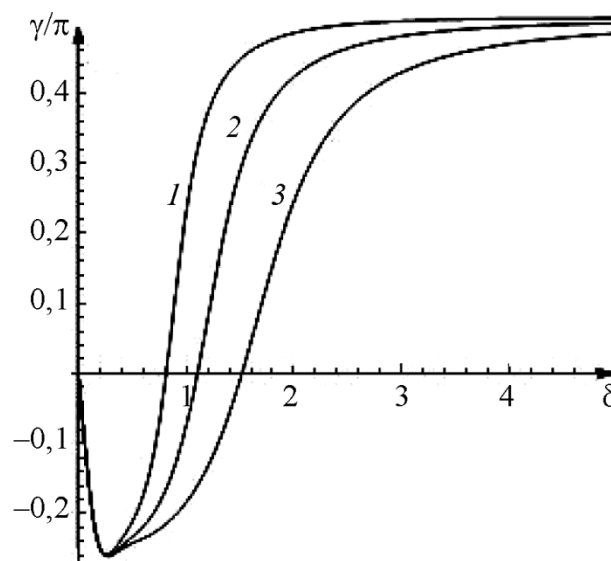


Рис. 6. График изменения угла γ_μ в верхнем слое с ростом относительной глубины δ . Кривые построены при использовании следующих значений параметров: 1 – $Mg = 0,05$;

$$B_1 = 10; B_2 = 0; k\delta = 5; 2 - Mg = 0,1; B_1 = 10; B_2 = 0; k\delta = 5;$$

$$3 - Mg = 0,2; B_1 = 10; B_2 = 0; k\delta = 5$$

Следовательно, угол между вектором скорости жидкости и вектором градиента температуры стремится к $\pi/2$ при стремлении глубины к бесконечности (рис. 6). Наиболее интересен для задач геофизической гидродинамики противоположный предельный переход, когда относительная толщина δ близка нулю. В этом случае, как показывает анализ формулы (16), угол Экмана всегда тупой и зависит от граничных условий и параметров жидкости.

5. Заключение

В работе получено аналитическое решение уравнений Навье–Стокса, описывающее конвекцию Бенара–Марангони вязкой несжимаемой жидкости. Построено аналитическое выражение угла Экмана конвективного течения несжимаемой жидкости. Проведено аналитическое исследование угла Экмана. Угол представлен в виде суммы двух углов – угла между вектором градиента температуры и осью Ox и угла, определяемого параметрами потока. Показано, что при большой глубине вектор скорости потока на свободной поверхности поворачивается на $\gamma_\mu = \pi/2$ относительно вектора градиента температуры. Предельное значение угла поворота вектора скорости γ_μ не зависит от коэффициента Марангони.

Литература

1. Pedlosky J. Geophysical fluid dynamics. – Berlin, New York : Springer, 1987.
2. Gill A. E. Atmosphere-Ocean Dynamics. – New York : Academic Press, 1982.
3. Ekman V. W. On the influence of the Earth's rotation on ocean-currents // Ark. Mat. Astron. Fys. – 1905. – Vol. 2, No. 11. – P. 1–52.
4. Aristov S. N., Knyazev D. V., Polyanin A. D. Exact solutions of the Navier–Stokes Equations with the linear dependence of velocity components on two space variables // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. – 2009. – Vol. 43, No. 5. – P. 642–662. – DOI: 10.1134/S0040579509050066.
5. Бурмашева Н. В., Просвирыков Е. Ю. Точное решение уравнений Навье–Стокса, описывающее пространственно неоднородные течения вращающейся жидкости // Труды Института математики и механики УрО РАН. – 2020. – Т. 26, вып. 2. – С. 79–87.
6. Бурмашева Н. В., Просвирыков Е. Ю. Класс точных решений для двумерных уравнений геофизической гидродинамики с двумя параметрами Кориолиса // Известия Иркутского государственного университета. Серия Математика. – 2020. – Т. 32. – С. 33–48. – DOI: 10.26516/1997-7670.2020.32.33.
7. Фельзенбаум А. И. Теоретические основы и методы расчета установившихся морских течений. – М. : Изд-во Акад. наук СССР, 1960. – 127 с.
8. Должанский Ф. В. Лекции по геофизической гидродинамике. – М. : ИВМ РАН, 2006. – 378 с.
9. Коротаев Г. К., Михайлова Э. Н., Шапиро Н. Б. Теория экваториальных противотечений в Мировом океане. – Киев : Наук. думка, 1986. – 208 с.

10. Зырянов В. Н. Теория установившихся океанических течений. – Л. : Гидрометеиздат, 1985. – 248 с.
11. Аристов С. Н., Просвирыков Е. Ю. О слоистых течениях плоской свободной конвекции // Нелинейная динамика. – 2013. – Т. 9, № 3. – С. 3–9.
12. Аристов С. Н., Шварц К. Г. Вихревые течения адвективной природы во вращающемся слое жидкости. – Пермь : ПГУ, 2006. – 155 с.
13. Аристов С. Н., Шварц К. Г. Вихревые течения в тонких слоях жидкости. – Киров : ВятГУ, 2011. – 207 с.
14. Aristov S. N., Shvarts K. G. Advective flow in a rotating liquid film // Journal of Applied Mechanics and Technical Physics. – 2016. – Vol. 57, No. 1. – P. 188–194. – DOI: 10.1134/S0021894416010211.
15. Ингель Л. Х., Аристов С. Н. Класс точных решений нелинейных задач о термических циркуляциях, связанных с объемным тепловыделением в атмосфере // Тр. Ин-та экспериментальной метеорологии. – 1996. – Вып. 27 (162). – С. 142–157.
16. Gorshkov A. V., Prosviryakov E. Yu. Convective flow in the solid rotation of a viscous incompressible fluid // AIP Conference Proceedings. – 2017. – 1915. – 040020. – DOI: 10.1063/1.5017368.
17. Gorshkov A. V., Prosviryakov E. Yu. Ekman Convective Layer Flow of a Viscous Incompressible Fluid // Izvestiya, Atmospheric and Oceanic Physics. – 2018. – Vol. 54, No. 2. – P. 189–195. – DOI: 10.1134/S0001433818020081.
18. Gorshkov A. V. Prosviryakov E. Yu. Analytical Study of the Ekman Angle for the Isothermal Flow of a Viscous Incompressible Fluid in View of the Navier Boundary Condition // AIP Conference Proceedings. – 2020. – Vol. 2315. – 020018. – DOI: 10.1063/5.0036889.
19. Constantin A., Johnson R. S. Atmospheric Ekman flows with variable eddy viscosity // Boundary-Layer Meteorology. – 2019. – Vol. 170. – P. 395–414. – DOI: 10.1007/s10546-018-0404-0.
20. Shrira V. I., Almelah R. B. Upper-ocean Ekman current dynamics: a new perspective // Journal of Fluid Mechanics. – 2020. – Vol. 887. – A 24. – DOI: 10.1017/jfm.2019.1059.
21. Existence and uniqueness and first order approximation of solutions to atmospheric Ekman flows / M. Fečkan, Y. Guan, D. O'Regan, J. R. Wang // Monatshefte für Mathematik. – 2020. – 193. – P. 623–636. – DOI: 10.1007/s00605-020-01414-7.
22. Global modes and large-scale structures in an Ekman boundary layer / J. L. Ortiz-Tarin, S. Lee, O. Flores, S. Sarkar // Journal of Physics: Conference Series. – 2020. – Vol. 1522. – P. 012011. – DOI: 10.1088/1742-6596/1522/1/012011.
23. Prosviryakov E. Y. New class of exact solutions of Navier–Stokes equations with exponential dependence of velocity on two spatial coordinates // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. – 2019. – Vol. 53, No. 1. – P. 107–114. – DOI: 10.1134/S0040579518060088.
24. Aristov S. N., Prosviryakov E. Y. A new class of exact solutions for three-dimensional thermal diffusion equations // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. – 2016. – Vol. 50, No. 3. – P. 286–293. – DOI: 10.1134/S0040579516030027.
25. Burmasheva N. V., Prosviryakov E. Yu. Isothermal layered flows of a viscous incompressible fluid with spatial acceleration in the case of three Coriolis parameters // Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures. – 2020. – Iss. 3. – P. 29–46. – DOI: 10.17804/2410-9908.2020.3.029-046. – URL: http://dream-journal.org/issues/2020-3/2020-3_291.html

26. Burmasheva N. V., Privalova V. V., Prosviryakov E. Yu. Layered Marangoni convection with the Navier slip condition // SADHANA-ACADEMY PROCEEDINGS IN ENGINEERING SCIENCES. – 2021. – Vol. 46, iss. 1, No. 55. – DOI: 10.1007/s12046-021-01585-5.
27. Towards understanding the algorithms for solving the Navier–Stokes equations / Sergey V. Ershkov, Evgeniy Yu. Prosviryakov, Natalya V. Burmasheva, and Victor Christianto // Fluid Dynamics Research. – 2021. – Vol. 53, No. 4. – P. 044501. – DOI:10.1088/1873-7005/ac10f0.

Received: 04.06.2021

Revised: 04.08.2021

Accepted: 27.08.2021

DOI: 10.17804/2410-9908.2021.4.050-061

INFORMATION AND ANALYTICAL TOOLS FOR ASSESSING THE STRUCTURAL SURVIVABILITY AND SAFETY OF TECHNOLOGICAL EQUIPMENT

E. M. Reizmund^{a)*}, S. V. Doronin^{b)}, and E. V. Moskvichev^{c)}

Federal Research Center for Information and Computational Technologies,
53 Mira Ave., Krasnoyarsk, 660049, Russian Federation

^{a)}  <https://orcid.org/0000-0003-1631-893X>  ReizmundEM@ict.nsc.ru;

^{b)}  <https://orcid.org/0000-0002-5256-3871>  sdoronin@ict.nsc.ru;

^{c)}  <https://orcid.org/0000-0002-2367-2649>  jugr@ict.nsc.ru

*Corresponding author. E-mail: ReizmundEM@ict.nsc.ru

Address for correspondence: PO box 25515, Krasnoyarsk, 660000, Russian Federation

Tel.: +7 (391) 227 72 96; fax: +7 (391) 212 42 88

The tasks of information and computational support for the analysis of the survivability and safety of power shells of technical objects are formulated, aimed at studying their properties taking into account damages and abnormal effects. To solve them, algorithms and computational tools have been developed, aimed at analyzing damage and assessing the risk of re-occurrence of accidents at technical objects, modeling the structural and mechanical heterogeneity of welded joints and calculating their crack resistance, parametric modeling of welded joints with defects, analyzing the sensitivity of structures to defects, damages, and off-design effects, and evaluating their survivability and safety. Information support has been developed, which contains a systematic list of factors reducing survivability and safety, the results of experimental studies of the crack resistance of welded joints and the survivability of shells with a developing macrocrack, as well as the accumulated results of solving model and applied problems on analyzing the properties of damaged shell structures, as reference data.

Keywords: shell structures, survivability, safety, information and computational support.

References

1. Makhutov N.A., Dukhanina L.N., Svetik F.F., Gadenin M.M., Bobrov Yu.V., Barykin A.N., Zakablutskaya Ye.A., Yudina O.N. Science and technology in the analysis of new challenges and threats in the substantiation of integrated security. In: *Bezopasnost Rossii. Pravovye, sotsialno-ekonomicheskie i nauchno-tehnicheskie aspekty. Informatsionnyi byulleten* [Safety of Russia: Multivolumed Series]. Moscow, MGOF «Znaniye» Publ., 2021, 152 p. (In Russian).
2. Barishpolets V.A., Bekker A.D., Bobrov Yu.V., Vlasov Yu.V., Gadenin M.M., Korchak V.Yu., Krivopuskov V.V., Litvinov V.B., Makhutov N.A., Reznikov D.O., Yudin A.Yu. *Bezopasnost Rossii: Tematicheskii blok Natsionalnaya bezopasnost* [Safety of Russia: Thematic Topic “National Safety”]. Moscow, MGOF «Znanie» Publ., 2021, 432 p. ISBN 978-5-87633-195-3. (In Russian).
3. Makhutov N.A., Cherepanov A.P., Lisanov M.V. Tasks of the development and implementation of enterprise industrial safety management system when operating technical devices. *Bezopasnost truda v promyshlennosti*, 2021, No. 2, pp. 15–19. DOI 10.24000/0409-2961-2021-2-15-19. (In Russian).
4. Mahutov N.A., Reznikov D.O. Multilevel Survivability Assessment of Complex Technical Systems with Account for Large-Scale and Structural Hierarchy of Damages and Destruction Accumulation Processes. *Safety in Technosphere*, 2016, vol. 5, iss. 4, no. 4, pp. 3–17. (In Russian).

5. Makhutov N.A., Reznikov D.O., Petrov P.V. Assessment of survivability of complex technical systems. *Problemy Bezopasnosti i Chrezvychaynykh Situatsiy*, 2009, no. 3. pp. 47–66. (In Russian).
6. Lepikhin A.M., Makhutov N.A., Shokin Yu.I. Probabilistic multiscale modeling of fracture in heterogeneous materials and structures. *Industrial laboratory. Diagnostics of materials*, 2020, 86 (7), pp. 45–54. DOI: 10.26896/1028-6861-2020-86-7-45-54. (In Russian).
7. Lepikhin A.M., Makhutov N.A., Shokin Yu.I., Yurchenko A.V. Analysis of risk concept for technical systems using digital twins. *Vychislitelnye Tekhnologii*, 2020, no. 4, pp. 99–113. DOI: 10.25743/ICT.2020.25.4.009. (In Russian).
8. Makhutov N.A., Gadenin M.M., Maslov S.V., Reznikov D.O., Pichkov S.N., Panov V.A. Investigation of the Influence of Operational Loading Regimes on the Service Life of Nuclear Power Plants. In: H. Altenbach, V.A. Eremeyev, L.A. Igumnov, eds. In: *Multiscale Solid Mechanics*, Advanced Structured Materials series, Springer, 2021, vol 141, pp. 319–330. DOI: 10.1007/978-3-030-54928-2_24.
9. Makhutov N.A., Gadenin M.M., Reznikov D.O. Assessment of extreme thermo-mechanical states of engineering systems under operating loading conditions. *Acta Mechanica*. 2021. vol. 232, No. 5, pp. 1829–1839. DOI 10.1007/s00707-020-02920-3.
10. Makhutov N.A., Lepikhin A.M., Leshchenko V.V. Scientific and methodological provision of safety of subsea pipelines with defects using risk criteria. *Zavodskaya laboratoriya. Diagnostika materialov*, 2021, vol. 87. no. 6, pp. 45–53. DOI 10.26896/1028-6861-2021-87-6-45-53. (In Russian).
11. Makhutov N.A., Panov A.N. Improving the scientific base and regulatory justification of the safety of wheeled mobile vehicles. *Problemy Bezopasnosti i Chrezvychaynykh Situatsiy*, 2021, no. 1, pp. 34–43. DOI 10.36535/0869-4176-2021-01-5. (In Russian).
12. Makhutov N.A., Makarenko I.V., Makarenko L.V. Features of an estimation low temperatures of crack resistance for cryogenic techniques. In: *Zhivuchest i konstruksionnoye materialovedeniye (ZhiVKoM-2020)* [The 5th International Scientific and Technical on line Conference “Survivability and Structural Science of Materials”: collection of papers]. Moscow, October 27–29 2020, Moscow, IMASH im. A.A. Blagonravova RAN Publ., 2020, pp. 154–157. (In Russian).
13. Zhuravkov M.A., Bogdanovich A.V., Shemet L.A., Nikolaychik M.A., Dembovsky I.N., Makhutov N.A., Gadenin M.M., Reznikov D.O., Yudina O.N. Modelling of contact interaction between parts of the lifting mine complex at safety estimations. *Problemy bezopasnosti i chrezvychaynykh situatsiy*, 2021, No. 4, pp. 9–25. DOI: 10.36535/0869-4179-2021-04-1. (In Russian).
14. Makhutov N.A., Nadein V.A., Blednova Zh.M., Neganov D.A., Shauro A.N. Problems of substantiating the strength and safety of main pipelines, taking into account the stages of the life cycle, hazardous technogenic and natural factors. *Problemy bezopasnosti i chrezvychaynykh situatsiy*, 2021, no. 1, pp. 5–17. DOI: 10.36535/0869-4176-2021-01-1. (In Russian).
15. Makhutov N.A., Kossov V.S., Oganyan E.S., Volokhov G.M., Ovechnikov M.N., Protopopov A.L. Prediction of contact-fatigue damage to rails using computational-experimental methods. *Zavodskaya laboratoriya. Diagnostika materialov*, 2020, vol. 86, No. 4, pp. 46–55. DOI: 10.26896/1028-6861-2020-86-4-46-55. (In Russian).
16. Makhutov N.A. Management of safety of critical and strategically important marine mobile facilities according to risk creation. In: Sb. tr. konf. “*Upravlenie v morskikh sistemakh*” (UMS -2020): 13-ya Mul'tikonferentsiya po problemam upravleniya [Proceedings of the “Management of Maritime systems” (UMS-2020)], St. Petersburg, October 07–08 2020, St. Petersburg, Kontsern “CNII “Elektropribor” Publ., 2020, pp. 21–22. (In Russian).

17. Moskvichev E.V., Lepihin A.M. Structural and mechanical heterogeneity and fracture toughness of welded joints of steels 09Mn2Si and 12Cr18Ni10Ti. *Zavodskaya laboratoriya. Diagnostika materialov*, 2013, no 6, pp. 50–54. (In Russian).
18. Rogalev A.N., Doronin S.V., Reizmunt E.M. Experience in solving and formulating inverse problems of structural strength and survivability. *Trudy mezhdunarodnoy konferentsii "Aktualnyye problemy vychislitel'noy i prikladnoy matematiki-2015"*, posvyashchennoy 90-letiyu so dnya rozhdeniya akademika Guriya Ivanovicha Marchuka [Proceedings of International Conference dedicated to 90th anniversary of G.I. Marchuk's birth "Actual problems of computational and applied mathematics-2015"], Novosibirsk, Abvey, 19–23 October 2015, 916 p. (In Russian).
19. Moskvichev E.V. An evaluation of the fracture toughness of a thin-walled pressure vessel with account for the structural and mechanical inhomogeneity of the welded joint. *J. Mach. Manuf. Reliab.*, 2015, vol. 44, pp. 32–37. DOI: 10.3103/S1052618815020119.
20. Moskvichev E. Fracture assessment of cracked welded structures considering the heterogeneity of welded joints. *Procedia Materials Science*, 2014, vol. 3, pp. 556–561. DOI: 10.1016/j.mspro.2014.06.092.
21. Larionov V.P., Moskvichev V.V., Doronin S.V. Fracture toughness analysis of typical welded joints of excavator metal structures. *Sibirskiy fiziko-tekhnicheskii zhurnal*, 1993, vol. 2, pp. 104–113 (In Russian).
22. Shokin Yu.I., Moskvichev V.V., Lepihin A.M. *Veroyatnostnyye modeli tekhnologicheskoy defektnosti svarnykh soyedineniy* [Probabilistic models of technological defects in welded joints]. Krasnoyarsk, VTs SO AN SSSR Publ., 1988. (In Russian).
23. Moskvichev V.V., Doronin S.V. Assessment and optimization of durability and reliability in the life design of welded structures. *Zavodskaya laboratoriya. Diagnostika materialov*, 1996, no 3, pp. 38–42. (In Russian).
24. Stoer M., Wagner F. A simple min-cut algorithm. *Journal of the ACM*, 1997, vol. 44, no. 4, pp. 585–591. DOI: 10.1145/263867.263872.

Подана в журнал: 04.06.2021

УДК 62-19:621.45.017

DOI: 10.17804/2410-9908.2021.4.050-061

ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКИЕ СРЕДСТВА ОЦЕНКИ КОНСТРУКЦИОННОЙ ЖИВУЧЕСТИ И БЕЗОПАСНОСТИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ОБОРУДОВАНИЯ

Е. М. Рейзмунт^{а)*}, С. В. Доронин^{б)}, Е. В. Москвичев^{в)}*Федеральный исследовательский центр информационных и вычислительных технологий,
г. Красноярск, Российская Федерация*^{а)}  <https://orcid.org/0000-0003-1631-893X>  ReizmundEM@ict.nsc.ru;^{б)}  <https://orcid.org/0000-0002-5256-3871>  sdoronin@ict.nsc.ru;^{в)}  <https://orcid.org/0000-0002-2367-2649>  jugr@ict.nsc.ru

*Ответственный автор. Электронная почта: ReizmundEM@ict.nsc.ru

Адрес для переписки: а/я 25515, г. Красноярск, 660000, Российская Федерация,

Тел.: +7 (391) 227-72-96; факс: +7 (391) 212-42-88

Сформулированы задачи информационно-вычислительного обеспечения анализа живучести и безопасности силовых оболочек технических объектов, направленные на изучение их свойств с учетом повреждений и нештатных воздействий. Для их решения разработаны алгоритмы и вычислительные средства, направленные на анализ аварий и оценку риска их повторного возникновения, моделирование структурно-механической неоднородности и расчет трещиностойкости сварных соединений, параметрическое моделирование сварных соединений с дефектами, анализ чувствительности конструкций к дефектам, повреждениям и запроектным воздействиям, оценку живучести и безопасности технологического оборудования (ТО). Разработано информационное обеспечение, содержащее в качестве справочных данных систематизированный перечень факторов снижения живучести и безопасности ТО, результаты экспериментальных исследований трещиностойкости сварных соединений и живучести оболочек с развивающейся макротрещиной, накопленные результаты решения модельных и прикладных задач анализа свойств повреждаемых оболочечных конструкций.

Ключевые слова: оболочечные конструкции, живучесть, безопасность, информационно-вычислительное обеспечение.

1. Введение

Исследования общих вопросов анализа и обеспечения техногенной безопасности [1–3] на всех иерархических уровнях элементов инфраструктуры формируют цели и задачи в области конструкционной прочности и живучести отдельных типов и классов технических систем, комплексов объектов, инженерных сооружений, машин и оборудования. Они касаются как общих методических вопросов анализа конструкционной прочности и живучести [4–7], так и технических объектов с учетом их отраслевой специфики [8–16]. В статье рассмотрены возможности практического получения количественных оценок живучести и безопасности технологического оборудования, преимущественно состоящего из сварных оболочечных конструкций.

Анализ конструкционной живучести и безопасности технологического оборудования предполагает получение количественных оценок характеристик, описывающих поведение конструкций в поврежденном состоянии и в условиях запроектного нагружения. В силу этого актуально развитие как информационного обеспечения, так и инструментальных средств оценивания и анализа живучести и безопасности.

Информационное обеспечение анализа живучести и безопасности технологического оборудования дает возможность использовать следующие справочные данные:

- систематизированный перечень факторов снижения живучести и безопасности ТО;
- результаты экспериментальных исследований трещиностойкости сварных соединений и живучести элементов конструкций с развивающейся макротрещиной;
- накопленные результаты решения модельных и прикладных задач анализа свойств повреждаемых конструкций ТО.

2. Описание информационно-аналитической системы

Систематизация факторов снижения живучести и безопасности направлена на информационное обеспечение анализа уязвимостей, формирующих предпосылки к повреждению и разрушению силовых конструкций. Рассмотрены конструктивные (особенности, порождающие сингулярность численных решений; фактически неудачные технические решения, выявленные при эксплуатации конструкций) и технологические (нарушения технологических процессов сварки и технологии монтажа) факторы.

Описание конструктивных факторов включает эскизы, чертежи, схемы, фотографии, иллюстрирующие неудачные конструктивные решения, последствия в виде зон трещинообразования и разрушения.

Описание технологических факторов представлено в табличной форме, и в виде правил логического вывода вида ЕСЛИ <Предпосылка> ТО <Заключение>, в которых предпосылками являются события, процессы, явления, приводящие к нарушению технологических правил сварки, а заключениями – негативные последствия, приводящие к снижению живучести и безопасности технических объектов.

Результаты экспериментальных исследований механических свойств и трещиностойкости сварных соединений представлены средними значениями и коэффициентами вариации предела текучести, временного сопротивления и J -интеграла сталей 09Г2С и 12Х18Н10Т, широко используемых в современном машиностроении для изготовления сосудов, аппаратов, емкостей, трубопроводов и других объектов, работающих под давлением (таблица).

Средние значения $\bar{X}$ и коэффициенты вариации n механических свойств и J -интеграла в зонах сварного соединения [17]

Зона сварного шва	Предел текучести		Временное сопротивление		J -интеграл	
	$\bar{X}$, МПа	n	$\bar{X}$, МПа	n	$\bar{X}$, кДж/м ²	n
09Г2С						
Основной металл	442	0,04	593	0,02	84	0,14
Зона термовлияния	466	0,07	631	0,01	87	0,26
Металл шва	414	0,06	571	0,04	89	0,07
12Х18Н10Т						
Основной металл	397	0,07	686	0,004	481	0,05
Зона термовлияния	406	0,05	668	0,02	545	0,19
Металл шва	420	0,16	661	0,07	495	0,04

Справочные результаты экспериментальных исследований живучести типовых оболочечных элементов конструкций с макроскопическими трещинами содержат характерные траектории развития усталостных трещин, которые могут быть использованы для прогнозных оценок долговечности оболочечных конструкций. Систематизация результатов решения задач анализа повреждаемых конструкций предполагает структурирование и представление данных в виде следующих информационных единиц:

- описание технического объекта;

- описание проблемной ситуации (рис. 1);
- исходные данные для постановки исследования;
- используемые характеристики живучести и безопасности, унифицированные постановки задач исследования;
- особенности постановки задач и основные результаты.

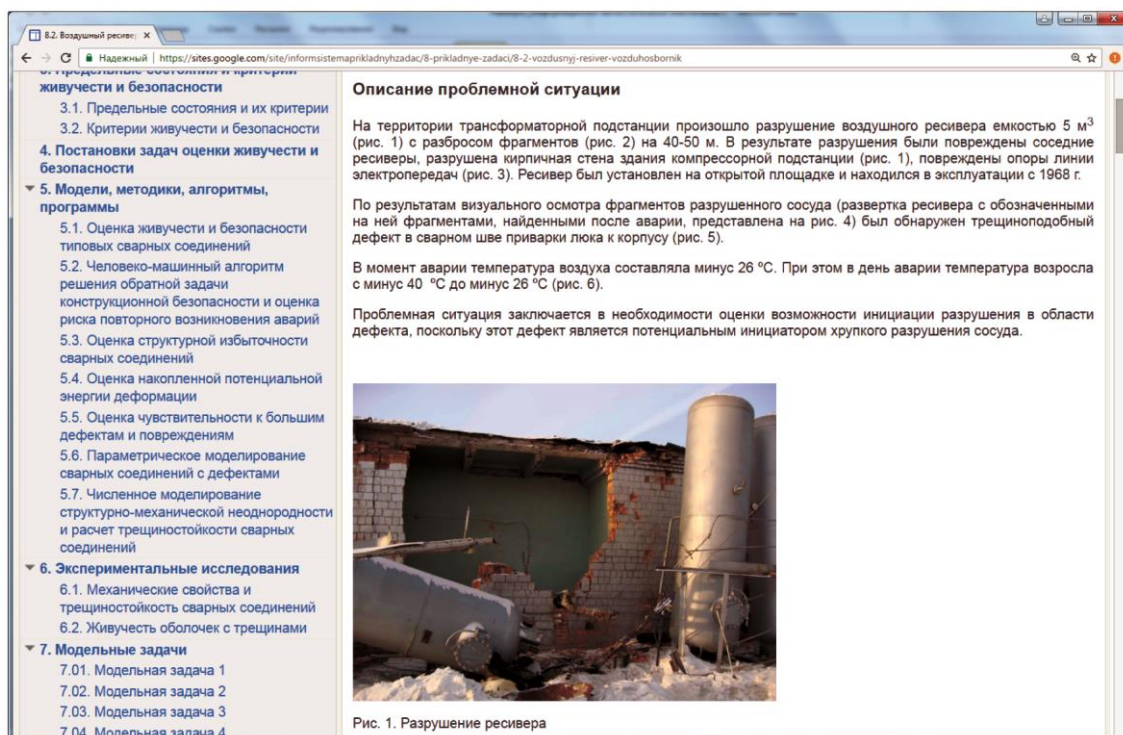


Рис. 1. Описание проблемной ситуации в информационной системе

В развитии инструментальных средств преобладает разработка оригинальных прогнозистических процедур, вычислительных алгоритмов и программного обеспечения, направленных на реализацию следующих функций:

- анализ аварийных разрушений и оценка риска повторного возникновения аварий технических объектов;
- моделирование структурно–механической неоднородности и расчет трещиностойкости сварных соединений;
- параметрическое моделирование сварных соединений с дефектами;
- анализ чувствительности конструкций к дефектам, повреждениям и запроектным воздействиям;
- оценка живучести и безопасности, структурной избыточности, потенциальной энергии деформации сварных соединений.

Анализ аварийных разрушений осуществляется с использованием человеко-машинного алгоритма решения обратных задач [18], включающего исследование особенностей напряженного состояния конструкций в нештатных ситуациях и при различных вариантах развития аварии; разработку структурных моделей силовых конструкций, позволяющих установить закономерности разрушения силовых конструкций; моделирование причинно-следственных связей, приводящих к последовательным разрушениям. При постановке обратных задач в качестве следствия рассматриваются фактические повреждения и разрушения, а в качестве причин – нерасчетные (завышенные) нагрузки и воздействия произвольной природы, нарушение граничных условий (проектных условий взаимодействия с окружающими элементами

природной среды и техносферы), наличие дефектов (преимущественно сплошности материала и сборки конструкции).

Моделирование структурно-механической неоднородности и расчет трещиностойкости сварных соединений обеспечиваются разработанным алгоритмом, реализованным в виде макроса в среде конечно-элементного моделирования ANSYS, написанным на языке APDL (ANSYS Parametric Design Language). Согласно алгоритму конечно-элементные модели сварных соединений учитывают стохастический характер распределения механических свойств в различных зонах сварного шва. Материал сварного соединения представляется совокупностью малых структурных элементов со случайными значениями предела текучести и временного сопротивления, изменяющимися в различных зонах сварного шва согласно некоторому закону распределения [19, 20]. Таким образом, каждый структурный элемент сварного соединения обладает собственной диаграммой деформирования.

При расчете на трещиностойкость рассматриваемой модели сварного соединения в упругопластической постановке используется энергетический критерий, основанный на концепции J -интеграла. Это позволяет учитывать нелинейность процессов деформирования, а также распределение механических свойств не только в вершине, но и в окрестности трещины.

Параметрическое моделирование сварных соединений с дефектами позволяет при отсутствии достоверных данных относительно геометрических характеристик и зон локализации дефектов и повреждений получить интервальные оценки напряженно-деформированного состояния элементов конструкций с дефектами и повреждениями, широко используемые при анализе их живучести и безопасности. Неопределенность снижается посредством автоматизации многовариантного численного анализа с варьированием геометрических характеристик поврежденных зон с целью поиска наихудших с позиций живучести и безопасности результатов.

На языке APDL разработан макрос построения и анализа параметрической модели конструкции патрубкового узла цилиндрического сосуда давления с эллиптическими днищами. В качестве обобщенной модели дефекта типа «пора» и «включение» рассматривается несплошность в виде эллипсоида вращения, варьирование соотношения величин осей которого позволяет в широком диапазоне моделировать геометрию дефектов. Геометрия сосуда и патрубкового узла с дефектом сварного шва описывается множеством параметров, из которых одни (внутренний радиус обечайки сосуда; соотношение осей эллиптического днища; толщина стенки сосуда; высота цилиндрической обечайки сосуда; внутренний радиус патрубка; толщина стенки патрубка; давление; катет шва) формируют геометрию и нагружение узла, а другие (большая и малая оси эллиптического дефекта; параметры локализации дефекта в сечении сварного шва) – размер и положение дефекта. В автоматическом режиме по результатам анализа определяется интенсивность распределения напряжений по Мизесу в области локализации дефекта. Доступны для анализа и другие характеристики напряженно-деформированного состояния.

Анализ чувствительности конструкций к дефектам, повреждениям и запроектным воздействиям предполагает отслеживание отклика системы на малое воздействие извне (увеличение нагрузки) либо деградационные изменения внутри конструкции (развитие дефекта или повреждения). Применительно к оценке живучести силовых конструкций с дефектами, повреждениями и в условиях запроектных воздействий в качестве такого малого воздействия предлагается рассматривать единичное приращение размера дефекта da либо величины нагрузки dP , а в качестве реакции – результирующее изменение пиковых значений интенсивности напряжений dy . Тогда в качестве оценки чувствительности рассматривается отношение dy к da (dP) как функция размера дефекта или повреждения (нагружения) $dy/da = f(a)$ ($dy/dP = f(P)$). Такая количественная оценка чувствительности не является критериальной характеристикой, поскольку отсутствует достоверная база для сравнительного анализа.

Оценки чувствительности, получаемые для различных конструктивных зон одного или нескольких объектов, позволяют судить об уровне живучести с использованием качественных характеристик: «очень высокая», «высокая», «средняя», «низкая», «очень низкая».

Оценка живучести и безопасности типовых сварных соединений основана на алгоритме расчета циклической трещиностойкости сварных соединений с трещиноподобным дефектом [21]. В соответствии со статистическими исследованиями описание дефекта осуществляется в вероятностной постановке в предположении Вейбулловского распределения его размеров [22]. Алгоритм реализует метод статистических испытаний (Монте–Карло) для моделирования кинетики трещины в сварном соединении. Для его практического использования разработано приложение для Windows (рис. 2). На основании прогнозируемых статистических оценок циклической долговечности выполняется построение полных вероятностных диаграмм живучести [23], связывающих характеристики вероятности, долговечности с уровнями нагруженности и поврежденности, характеризуемой размерами и локализацией трещиноподобного дефекта.

Наличие и степень структурной избыточности могут быть оценены с использованием графовых моделей структуры сварной оболочечной конструкции, в которых элементы (детали) представляются вершинами графа, а сварные швы – его ребрами (дугами). Структурная избыточность, наличие нескольких путей передачи силового потока являются факторами, способствующими повышению живучести ТО. При анализе связей элементов в рамках структурной схемы выявляем, приводит ли разрыв связи к потере конструкционной целостности или сохраняются альтернативные пути передачи силового потока. В этом случае оценки живучести носят качественный характер и отвечают на вопрос: обладает ли конструкция свойством живучести (имеются избыточные структурные связи) или нет (избыточных связей нет и разрыв любой из них означает нарушение конструкционной целостности).

Циклическая трещиностойкость типовых сварных соединений

Исходные данные

Расчетная схема

Трещиностойкость K_{Ic} , $\text{кН}/(\text{мм}^{3/2})$

Размах напряжений, $\text{кН}/\text{мм}^{3/2}$

Толщина t , мм

☒ Стыковое с подрезом

☐ Крестообразное с непроваром

☐ Крестообразное с подрезом

Параметры кинетического уравнения роста трещины

$$da/dN = C(\Delta K)^m$$

C

m

Параметры распределения длины дефекта по закону Вейбулла

$$F(a) = 1 - \exp\left(-\left(\frac{a}{\theta}\right)^\beta\right)$$

Бэ́та Тэ́та

OK

Результаты: параметры распределения долговечности

Матожидание, цикл

Среднеквадратическое отклонение

Рис. 2. Интерфейс программы расчета типовых сварных соединений с дефектами

Оценка структурной избыточности сварных соединений реализуется с помощью следующего алгоритма:

- 1) анализ сварной оболочечной конструкции и построение ее структурной модели;
- 2) визуализация графа и построение его матрицы смежности;
- 3) вычисление минимального разреза графа $n_{\min}$ с помощью разработанного приложения, реализующего алгоритм Штор–Вагнера [24];
- 4) оценка структурной избыточности сварных соединений $n_{\min} - 1$.

Уровень накопленной в конструкции потенциальной энергии деформации является одним из факторов, формирующих ее техногенную опасность. Это вытекает из превращения энергии деформации как в энергию, затрачиваемую на разрушение, так и в кинетическую энергию элементов конструкции при нарушении ее целостности. Очевидно, увеличение уровня накопленной потенциальной энергии деформации сопровождается снижением безопасности эксплуатации технического объекта.

Несмотря на то, что количественная оценка накопленной энергии деформации не вызывает затруднений, существует неопределенность относительно критических (соответствующих опасному состоянию объекта) значений потенциальной энергии деформации. Таким образом, можно говорить о применении оценок потенциальной энергии деформации в качестве нечеткой характеристики безопасности.

В общем случае для оценки накопленной в объеме материала потенциальной энергии деформации используется выражение

$$u = \frac{1}{2} \int_V (\sigma_1 \varepsilon_1 + \sigma_2 \varepsilon_2 + \sigma_3 \varepsilon_3) dV,$$

для дискретной (конечно-элементной) модели размерности N , принимающее вид

$$u = \frac{1}{2} \sum_1^N (\sigma_1 \varepsilon_1 + \sigma_2 \varepsilon_2 + \sigma_3 \varepsilon_3).$$

Вычислительная технология оценки накопленной в объеме материала сварного шва потенциальной энергии деформации, отнесенной к единице его длины, реализована в среде конечно-элементного анализа с применением макроса на языке APDL и включает следующие основные этапы:

- 1) описание сварных швов самостоятельными объемами при разработке твердотельной модели;
- 2) выделение на стадии расчета НДС конечных элементов, ассоциированных с объемами сварных швов;
- 3) вычисление величины потенциальной энергии деформации, накопленной в каждом i -м ($i = 1, N$) конечном элементе;
- 4) организацию цикла суммирования по объему каждого сварного шва величин потенциальной энергии деформации, накопленной в каждом конечном элементе;
- 5) отнесение накопленной в объеме сварного шва потенциальной энергии деформации к единице его длины.

3. Результаты и обсуждение

Разработанные информационно-аналитические средства реализуют системный подход к постановке и решению задач анализа живучести и безопасности технических объектов, содержащих силовые оболочечные конструкции.

Наибольшая эффективность информационно-вычислительного ресурса достигается при следующей технологии последовательного использования его составных частей:

- качественный анализ наличия конструктивных и технологических факторов снижения живучести и безопасности с целью идентификации уязвимостей и обоснования рекомендаций по их устранению;
- выбор одного или нескольких предельных состояний, возможных для рассматриваемого объекта;
- выбор предлагаемых критериев живучести и безопасности, соответствующих принятым предельным состояниям, структуре и свойствам технического объекта;
- анализ систематизированных возможных постановок задач живучести и безопасности рассматриваемого технического объекта с целью свести его к одной или нескольким унифицированным постановкам модельных и прикладных задач. При этом целесообразен анализ накопленного практического опыта решения этих задач;
- использование для оценки выполнения критериев живучести и безопасности как общетехнических методов, так и разработанных в рамках проекта специализированных методик, алгоритмов, программ;
- использование при получении оценок живучести и безопасности экспериментальных данных по механическим свойствам сталей, условиям инициации и распространения трещин в элементах оболочечных конструкций.

4. Заключение

Разработанные информационное обеспечение и инструментальные средства интегрированы в информационную систему «Живучесть и безопасность оболочечных конструкций технических объектов», реализованную в виде Web-приложения: <https://sites.google.com/site/informsistemaprikladnyhzadac/>

Накопление результатов решения задач анализа повреждаемых конструкций обеспечивает научно-методическое обеспечение научно-технической экспертизы аварийных разрушений и техногенных катастроф.

Литература

1. Наука и технологии в проблемах анализа новых вызовов и угроз при обосновании комплексной безопасности : итоговые материалы по I–II этапам и перспективам реализации многотомного издания «Безопасность России. Правовые, социально-экономические и научно-технические аспекты : информационный бюллетень» / Н. А. Махутов, Л. Н. Духанина, Ф. Ф. Светик, М. М. Гаденин, Ю. В. Бобров, А. Н. Барыкин, Е. А. Закаблущая, О. Н. Юдина. – Москва : МГОФ «Знание», 2021. – 152 с. – ISBN 978-5-87633-196-0.
2. Безопасность России. Правовые, социально-экономические и научно-технические аспекты. Безопасность сложных человеко-машинных систем : тематический блок «Национальная безопасность» / В. А. Барিশполец, А. Д. Беккер, Ю. В. Бобров, Ю. В. Власов, М. М. Гаденин, В. Ю. Корчак, В. В. Кривоусков, В. Б. Литвинов, Н. А. Махутов, Д. О. Резников, А. Ю. Юдин. – Москва : МГОФ «Знание», 2021. – 432 с. – ISBN 978-5-87633-195-3.
3. Махутов Н. А., Черепанов А. П., Лисанов М. В. Задачи разработки и реализации системы управления промышленной безопасностью предприятия при эксплуатации технических устройств // Безопасность труда в промышленности. – 2021. – № 2. – С. 15–19. – DOI: 10.24000/0409-2961-2021-2-15-19.
4. Махутов Н. А., Резников Д. О. Многоуровневая оценка живучести сложных технических систем с учетом масштабно-структурной иерархии процессов накопления повреждений и разрушения // Безопасность в техносфере. – 2016. – № 4. – С. 3–17.
5. Махутов Н. А., Резников Д. О. Оценка прочностной живучести технических систем // Проблемы безопасности и чрезвычайных ситуаций. – 2019. – № 3. – С. 47–57.

6. Лепихин А. М., Махутов Н. А., Шокин Ю. И. Вероятностное многомасштабное моделирование разрушений структурно-неоднородных материалов и конструкций // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. – 2020. – № 67. – С. 45–54.
7. Концепция риск-анализа технических систем с использованием цифровых двойников / А. М. Лепихин, Н. А. Махутов, Ю. И. Шокин, А. В. Юрченко // Вычислительные технологии. – 2020. – № 4. – С. 99–113.
8. Investigation of the influence of operational loading regimes on the service life of nuclear power plants / N. A. Makhutov, M. M. Gadenin, S. V. Maslov, Dmitry O. Reznikov, Sergey N. Pichkov, Vladimir A. Panov // Multiscale solid mechanics : strength, durability, and dynamics. – Switzerland : Springer Nature, 2021. – P. 319–330. – DOI: 10.1007/978-3-030-54928-2_24.
9. Makhutov N. A., Gadenin M. M., Reznikov D. O. Assessment of extreme thermo-mechanical states of engineering systems under operating loading conditions // Acta Mechanica. – 2021. – Vol. 232, No 5. – P. 1829–1839. – DOI 10.1007/s00707-020-02920-3.
10. Махутов Н. А., Лепихин А. М., Лещенко В. В. Научно-методическое обеспечение безопасности морских подводных трубопроводов с дефектами по критериям риска // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. – 2021. – Т. 87, № 6. – С. 45–53. – DOI 10.26896/1028-6861-2021-87-6-45-53.
11. Махутов Н. А., Панов А. Н. Совершенствование научной базы и нормативного обоснования безопасности колесных мобильных машин // Проблемы безопасности и чрезвычайных ситуаций. – 2021. – № 1. – С. 34–43. – DOI 10.36535/0869-4176-2021-01-5.
12. Махутов Н. А., Макаренко И. В., Макаренко Л. В. Особенности оценки низкотемпературной трещиностойкости для криогенной техники // Живучесть и конструкционное материаловедение (ЖивКоМ-2020) : сборник трудов V Международной научно-технической конференции в дистанционном формате, Москва, 27–29 октября 2020 года. – Москва : Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт машиноведения им. А. А. Благонравова Российской академии наук, 2020. – С. 154–157.
13. Моделирование контактного взаимодействия между элементами подъемного шахтного комплекса при оценках безопасности / М. А. Журавков, А. В. Богданович, Л. А. Шемет, М. А. Николайчик, И. Н. Дембовский, Н. А. Махутов, М. М. Гаденин, Д. О. Резников, О. Н. Юдина // Проблемы безопасности и чрезвычайных ситуаций. – 2021. – № 4. – С. 9–25.
14. Проблемы обоснования прочности и безопасности магистральных трубопроводов с учетом стадий жизненного цикла, опасных техногенных и природных факторов / Н. А. Махутов, В. А. Надеин, Ж. М. Бледнова, Д. А. Неганов, А. Н. Шауро // Проблемы безопасности и чрезвычайных ситуаций. – 2021. – № 1. – С. 5–17.
15. Прогнозирование контактно-усталостных повреждений рельсов расчетно-экспериментальными методами / Н. А. Махутов, В. С. Коссов, Э. С. Оганьян, Г. М. Волохов, М. Н. Овечников, А. Л. Протопопов // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. – 2020. – Т. 86, № 4. – С. 46–55. – DOI 10.26896/1028-6861-2020-86-4-46-55.
16. Махутов Н. А. Управление безопасностью по критериям рисков критически и стратегически важных морских подвижных объектов // Материалы конференции «Управление в морских системах» (УМС-2020) : 13-я МУЛЬТИКОНФЕРЕНЦИЯ ПО ПРОБЛЕМАМ УПРАВЛЕНИЯ, Санкт-Петербург, 07–08 октября 2020 года. – Санкт-Петербург, Концерн Центральный научно-исследовательский институт «Электроприбор», 2020. – С. 21–22.
17. Москвичев Е. В., Лепихин А. М. Структурно-механическая неоднородность и трещиностойкость сварных соединений сталей 09Г2С и 12Х18Н10Т // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. – 2013. – № 6. – С. 50–54.
18. Рогалев А. Н., Доронин С. В., Рейзмунт Е. М. Опыт решения и постановки обратных задач конструкционной прочности и живучести [Электронный ресурс] // Труды международной конференции «Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики-2015», посвященной 90-летию со дня рождения академика Гурия Ивановича Марчука, Абвей, 19–23

октября 2015 г. – Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук, Новосибирск, 2015. – 1 электрон. опт. диск. – 916 с.

19. Moskvichev E. V. An evaluation of the fracture toughness of a thin-walled pressure vessel with account for the structural and mechanical inhomogeneity of the welded joint // J. Mach. Manuf. Reliab. – 2015. – Vol. 44. – P. 32–37 – DOI 10.3103/S1052618815020119.

20. Moskvichev E. Fracture assessment of cracked welded structures considering the heterogeneity of welded joints // Procedia Materials Science. – 2014. – Vol. 3. – P. 556–561 – DOI 10.1016/j.mspro.2014.06.092.

21. Ларионов В. П., Москвичев В. В., Доронин С. В. Расчет на трещиностойкость типовых сварных соединений металлоконструкций экскаваторов // Сибирский физико-технический журнал. – 1993. – Вып. 2. – С. 104–113.

22. Шокин Ю. И., Москвичев В. В., Лепихин А. М. Вероятностные модели технологической дефектности сварных соединений – Красноярск : ВЦ СО АН СССР, 1988. – (Препр. АН СССР, Сиб. отд-ние, ВЦ; N 8.

23. Москвичев В. В., Доронин С. В. Оценка и оптимизация долговечности и надежности при ресурсном проектировании сварных конструкций // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. – 1996. – № 3. – С. 38–42.

24. Stoer M., Wagner F. A simple min-cut algorithm // Journal of the ACM. – 1997. – Vol. 44, No. 4. – P. 585–591. – DOI: 10.1145/263867.263872.