

**НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
імені ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»**

Інженерно-фізичний факультет

Кафедра фізики металів

До захисту допущено:

в.о. завідувача кафедри

_____ Світлана ВОЛОШКО

«__» _____ 20__ р.

Дипломна робота

на здобуття ступеня бакалавра

за освітньо-професійною програмою «Фізичне матеріалознавство»

спеціальності 132 «Матеріалознавство»

**на тему: «Концентраційна залежність параметрів дифузії Ni у
впорядкованій фазі B2-NiAl»**

Виконав:

студент IV курсу, групи ФМ-61-1

Легеза Роман Вячеславович _____

Керівник:

доцент КФМ, к.т.н., Владимирський І.А. _____

консультант з питань нормоконтролю:

ас. Шаповалова Н.А. _____

консультант з економічно-організаційної частини:

к.е.н., ст. викладач Нараєвський С.В. _____

консультант з охорони праці:

д.т.н., професор Левченко О.Г. _____

рецензент:

к.т.н., ас. Ворон М.М. _____

Засвідчую, що у цій дипломній роботі
немає запозичень з праць інших авторів
без відповідних посилань.

Студент _____

Київ – 2020 року

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

Інженерно-фізичний факультет

Кафедра фізики металів

Рівень вищої освіти – перший (бакалаврський)

Спеціальність – 132 «Матеріалознавство»

Освітньо-професійна програма «Фізичне матеріалознавство»

ЗАТВЕРДЖУЮ

в.о. завідувача кафедри

_____ Світлана ВОЛОШКО

«___» _____ 20__ р.

ЗАВДАННЯ

на дипломну роботу студенту

Легезі Роману Вячеславовичу

1. Тема роботи «Концентраційна залежність параметрів дифузії Ni у впорядкованій фазі $B2-NiAl$ », керівник роботи доцент КФМ, к.т.н. Владимирський І.А., затверджені наказом по університету від «21» травня 2020 р. № 1132-с

2. Термін подання студентом роботи _____ 09 червня 2020 року _____

3. Вихідні дані до роботи комп'ютерна модель впорядкованої фази $B2-NiAl$ з концентраціями Ni 45 ат.% - 47 ат.%, результати переддипломної практики. _____

4. Зміст роботи:

1) основна частина: аналіз літературних джерел по темі роботи, обґрунтування вибору об'єкту досліджень, вибір метода дослідження та опис методик проведення експериментів, опис отриманих експериментальних результатів та їх аналіз, оформлення висновків по отриманим результатам роботи. _____

2) організаційно-економічна частина: розрахунок вартості проведення науково-дослідної роботи, розрахунок коефіцієнта економічної ефективності роботи. _____

3) охорона праці: аналіз шкідливих факторів, небезпек та шляхи їх усунення. _____

5. Перелік ілюстративного матеріалу (із зазначенням плакатів, презентацій тощо): 72 сторінки, 20 рисунків, 7 таблиць, 1 презентація.

6. Консультанти розділів роботи *

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	завдання прийняв
Економічно-організаційний	к.е.н., ст.. викладач Нараєвський С.В.		
Охорона праці	д.т.н., професор Левченко О.Г.		

7. Дата видачі завдання 23 вересня 2019 року

Календарний план

№ з/п	Назва етапів виконання дипломної роботи	Термін виконання етапів роботи	Примітка
1	Видача завдання	23 вересня 2019 року	
2	Огляд літератури	23 вересня 2019 року – 23 жовтня 2019 року	
3	Освоєння методик дослідження	23 жовтня 2019 року – 14 листопада 2019 року	
4	Виконання експериментальних досліджень	14 листопада 2019 року – 04 березня 2020 року	
5	Отримання результатів, їх аналіз	04 березня 2020 року – 04 квітня 2020 року	
6	Оформлення дипломної роботи	04 квітня 2020 року – 04 червня 2020 року	
7	Попередній захист	09 червня 2020 року	
8	Захист на засіданні ЕК	16 червня 2020 року	

Студент

Роман ЛЕГЕЗА

Керівник

Ігор ВЛАДИМИРСЬКИЙ

* Якщо визначені консультанти. Консультантом не може бути зазначено керівника дипломної роботи.

РЕФЕРАТ

Дипломна робота: 72 сторінки, 7 таблиць, 20 рисунків, 62 літературних джерела.

ДИФУЗИЯ, МОЛЕКУЛЯРНА ДИНАМІКА, КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ, ІНТЕРМЕТАЛІД, NiAl, ВПОРЯДКОВАНА ФАЗА.

Об'єкт досліджень: комп'ютерно-імітаційна модель дифузійних процесів у впорядкованій фазі $B2\text{-NiAl}$, створена методом молекулярної динаміки.

Предмет дослідження: концентраційна залежність параметрів дифузійних процесів у впорядкованій фазі $B2\text{-NiAl}$.

Мета роботи: виявити вплив концентрації компонентів на розвиток процесів самодифузії за вакансійним механізмом у впорядкованій фазі $B2\text{-NiAl}$.

Методи дослідження: методи молекулярної динаміки.

Результати досліджень та їх новизна: встановлена концентраційна залежність коефіцієнту дифузії Ni за вакансійним механізмом у впорядкованій фазі $B2\text{-NiAl}$ – спостерігається прискорення дифузійних процесів зі зниженням вмісту Ni у фазі $B2\text{-NiAl}$ до 45 ат.% - 46 ат.%, що ймовірно пов'язано з тим, що основним механізмом дифузії в даному випадку є механізм за типом «потрійного дефекту».

ABSTRACT

Diploma work: 72 pages, 7 tables, 20 figures, 62 references.

DIFFUSION, MOLECULAR DYNAMICS, COMPUTER MODELLING, INTERMETALLIC, NiAl, ORDERED PHASE.

The object of research: computer model of diffusion processes in the ordered *B2*-NiAl phase, created by molecular dynamics approach.

The subject of research: concentration dependence of diffusion parameters in the ordered *B2*-NiAl phase.

Aim of the work: to identify the influence of components concentration on the development of self-diffusion processes mediated by vacancy mechanism in the ordered *B2*-NiAl phase.

Research methods: molecular dynamics.

Research results and novelty: the concentration dependence of the Ni diffusion coefficient on the vacancy mechanism in the ordered *B2*-NiAl phase was established - there is an acceleration of diffusion processes with a decrease of Ni content in the *B2*-NiAl phase to 45 at.% - 46 at.%, which is probably due to the main mechanism of diffusion in this case - "triple defect".

ЗМІСТ

ВСТУП.....	7
1 ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД	9
1.1 Інтерметаліди системи NiAl.....	9
1.2 Властивості та використання сплавів на основі NiAl	11
1.3 Кристалічна будова фази B2-NiAl	13
1.4 Дифузійні процеси в фазі B2-NiAl	15
1.4.1 Механізми дифузії в фазі B2-NiAl.....	20
1.5 Методи комп'ютерного моделювання	22
1.5.1 Метод молекулярної статистики	22
1.5.2 Методи Монте-Карло.....	22
1.5.3 Метод молекулярної динаміки.....	23
Висновки до розділу 1	25
2 МАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИКА ДОСЛІДЖЕНЬ	26
2.1 Молекулярнодинамічне моделювання за допомогою LAMMPS	26
2.2 Параметри молекулярнодинамічного моделювання	27
2.3 Обробка результатів роботи LAMMPS.....	29
Висновки до розділу 2	30
3 ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНА ЧАСТИНА	32
3.1 Вплив температури на середньоквадратичне відхилення та коефіцієнт дифузії атомів Ni у фазі B2-NiAl	32
3.2 Концентраційна залежність коефіцієнта дифузії Ni в фазі B2-NiAl.....	36
3.3 Енергія активації дифузії Ni в фазі B2-NiAl.....	40
Висновки до розділу 3	41
4 ОРГАНІЗАЦІЙНО-ЕКОНОМІЧНА ЧАСТИНА.....	43
4.1 Наукова-технічна актуальність НДР	43
4.2 Мета і завдання НДР	44
4.3 Розрахунок витрат на проведення НДР	44
4.3.1 Витрати на оплату праці.....	45

4.3.2 Розмір єдиного соціального внеску	46
4.3.3 Матеріали, необхідні для проведення досліджень	47
4.3.4 Витрати на електроенергію	47
4.3.5 Витрати на спеціальне обладнання	47
4.3.6 Вартість послуг сторонніх організацій	48
4.3.7 Витрати на службові відрядження.....	48
4.3.8 Інші непрямі невраховані витрати.....	48
4.3.9 Накладні витрати.....	48
4.3.10 Розрахунок планової кошторисної вартості теми	48
4.4 Науково-технічна ефективність НДР	49
Висновки до розділу 4	53
5 ОХОРОНА ПРАЦІ	54
5.1 Аналіз параметрів роботи в приміщенні	54
5.1.1 Аналіз складу повітря приміщення	57
5.2 Виявлення та аналіз шуму, вібрацій, ультра- та інфразвуку	57
5.3 Електробезпека	58
5.4 Освітлення.....	60
5.5 Пожежна безпека.....	61
5.6 Вимоги безпеки при виникненні аварійних ситуацій	62
Висновки до розділу 5	63
ВИСНОВКИ.....	64
CONCLUSIONS	65
СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ.....	66

ВСТУП

В сучасному світі використовуються сотні тисяч різноманітних матеріалів. Їх використання у певній галузі зумовлено фізичними, механічними або експлуатаційними характеристиками, ціною, складністю обробки або вироблення тощо. Матеріалознавці постійно намагаються поліпшити властивості вже відомих та розробити нові, більш дешеві, технологічні, міцні, термостійкі матеріали. Одною з найбільш вибагливих до експлуатаційних характеристик є авіабудівна галузь, яка вимагає створення сучасних матеріалів для виготовлення двигунів, що працюють в умовах великих напружень та температур, планерів літаків, що мають витримувати надвисокі навантаження.

Найбільш використовуваними жаростійкими та жароміцними сплавам у наш час є інтерметаліди на основі алюмінідів нікелю [1]. Використання даних інтерметалідів, у першу чергу, зумовлено їх високими показниками жаростійкості та жароміцності, а також схильністю до аномального зміцнення при підвищенні температури. Також даному класу матеріалів притаманна невисока щільність, і, як наслідок, невелика вага готових виробів. В чистому вигляді ці сплави не мають достатнього рівня властивостей, а тому, піддаються легуванню та додатковій термічній обробці, для досягнення бажаних рівнів жароміцності, жаростійкості, пластичності [1, 2].

Розглядаючи сплави системи NiAl (β -NiAl, γ -NiAl), слід зазначити, що, незважаючи на високу температуру плавлення, вони мають невисоку жароміцність за температур вище 800 °C [3]. Для підвищення жароміцності проводять легування такими тугоплавкими металами, як Cr, Mo, W, виділяють в β -NiAl включення γ -NiAl, додають тверді розчини інших металів [2].

Зважаючи на електронну та кристалічну будову фази $B2$ -NiAl, особливо при концентраціях Ni, що нижчі від стехіометричних значень, за рахунок утворення великої кількості вакансій, велику роль у формуванні фізико-механічних властивостей фази відіграють процеси дифузії. Це підводить до проблеми попереднього визначення фізико-механічних характеристик майбутніх сплавів.

Важливою матеріалознавчою задачею в цьому випадку постає визначення параметрів самодифузії для різних концентрацій Ni в сплаві β -NiAl та температурних режимів його експлуатації. Для проведення натурних експериментів необхідно витратити чимало ресурсів та часу, адже створення сплаву з заданою концентрацією вакансій та компонентів, а також замір параметрів самодифузії є доволі трудомісткими та повільними операціями. В той же час, використання методів комп'ютерного моделювання, таких як метод молекулярної динаміки та метод Монте-Карло дозволяють значно скоротити витрати на попередні дослідження. Швидкість та повний контроль над процесом, можливість у будь-який момент часу дослідити розподіл атомів, фазові та структурні перетворення є визначними показниками у виборі методу дослідження [4].

В даній роботі методом молекулярної динаміки досліджено вплив концентрації Ni в фазі $B2$ -NiAl на параметри процесу самодифузії в температурному інтервалі $1327\text{ }^\circ\text{C} - 1527\text{ }^\circ\text{C}$. Можливість молекулярнодинамічного моделювання за таких високих температур зумовлена особливістю структури фази $B2$ -NiAl: температура розупорядкування вища за температуру плавлення даного матеріалу [5].

Механічні та фізичні властивості NiAl вже доволі добре досліджені: невелика щільність у поєднанні з високою стійкістю до корозії, значними границею текучості, термостійкістю та теплопровідністю зумовили великий інтерес до даного сплаву. Проте, міграція дефектів та процеси дифузії, що мають великий вплив, наприклад, на опір повзучості, досліджені недостатньо [6].

1 ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД

1.1 Інтерметаліди системи NiAl

В системі NiAl можуть утворюватися наступні інтерметалідні сполуки: NiAl, Ni₃Al, Ni₂Al₃, Ni₅Al₃ [7, 8]. Відповідно до діаграми стану, що представлена на рис 1.1, інтерметалід NiAl має область гомогенності за високих температур в концентраційному інтервалі від 42 ат.% до 69 ат.% Ni, яка зменшується зі зниженням температури. Другий інтерметалід, що представляє науковий інтерес, Ni₃Al за високих температур має дуже вузьку область гомогенності при вмісті Ni ~ 74 ат.%, яка зі зменшенням температури, навпаки, розширюється.

Розглянемо дані сполуки більш детально. В основному використання знайшли інтерметаліди NiAl (β -фаза) та Ni₃Al (γ '-фаза) як такі, що мають найвищі температури плавлення. Обидва інтерметаліди зберігають свою структуру аж до температури плавлення.

NiAl (β -фаза) має температуру плавлення 1638 °C, об'ємноцентровану кристалічну решітку з надструктурою типу *B2*, тому часто називається *B2-NiAl* [4]. Ni₃Al (γ '-фаза) має дещо нижчу температуру плавлення, яка складає 1385 °C, гранецентровану кристалічну решітку з надструктурою типу *L1₂* [9]. Два інші інтерметаліди Ni₂Al₃ (δ -фаза) та NiAl₃ (ϵ -фаза) мають значно нижчі температури плавлення, 1133 °C та 854 °C, відповідно, що, вочевидь, недостатньо для використання, наприклад, для конструювання реактивних двигунів, температури газу в яких сягають 1050 °C. Тому матеріали на основі даних фаз не привернули уваги матеріалознавчої спільноти.

Наразі основними матеріалами для виготовлення турбореактивних двигунів є нікелеві суперсплави, температурною межею для яких є 1100 °C, а щільність складає порядку 8,5 г/см³ - 9 г/см³ [10]. Через наявність великої кількості легуючих елементів і особливості структури жароміцні нікелеві сплави мають нижчу за алюмініди нікелю стійкість до окислення у агресивних середовищах, що також є помітним недоліком. Сучасні авіабудівні компанії намагаються усіма

шляхами знизити вагу своїх літаків, збільшити їх паливну ефективність, зменшити витрати пального та знизити ціну обслуговування літаків. Використання β -NiAl та γ '-Ni₃Al дозволяє значно підвищити відношення «тяга двигуна/маса двигуна», зробити двигуни довговічнішими, що в перспективі дозволяє вести мову про здешевлення експлуатації авіації.

Слід відмітити, що β -NiAl, відповідно до табл. 1.1, має не тільки вищу температуру плавлення у порівнянні з γ '-Ni₃Al, а ще й значно нижчу щільність: 5,87 г/см³ проти 7,29 г/см³. При розробці сучасних турбореактивних двигунів велику увагу приділяють як його масі, так і робочій температурі. Ефективність газотурбінного двигуна збільшується зі збільшенням температури газу, відповідно, збільшуються робочі температури окремих деталей двигуна [9].

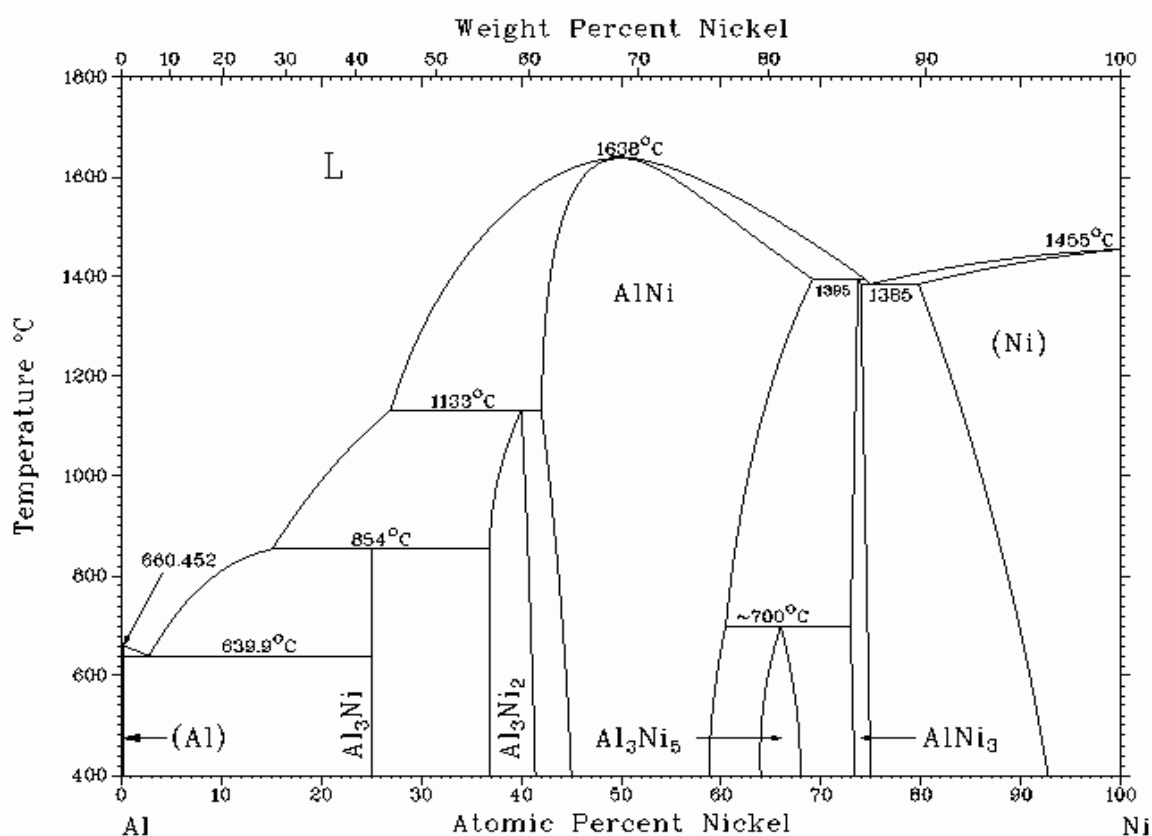


Рисунок 1.1 – Діаграма стану фазової рівноваги системи Ni-Al [11]

Також існує метастабільна фаза Ni₂Al₉, що утворюється при кристалізації збагачених алюмінієм сплавів і потім перетворюється у NiAl₃ [12].

Таблиця 1.1 – Деякі властивості інтерметалідів системи Ni-Al [13-15]

Інтерметалід (фаза)	NiAl ₃ (ε)	Ni ₂ Al ₃ (δ)	NiAl (β)	Ni ₃ Al (γ')
Вміст алюмінію в стехіометричній сполуці, ат.%/мас.%	25 / 13,28	50 / 31,49	60 / 40,81	75 / 57,96
Область гомогенності (вміст алюмінію), ат.%/мас.%	21,5 - 28 / 11,2 - 115,15	40 - 55 / 23,5 - 36,0	59,2 - 63,7 / 40 - 44,7	—
Символ Пірсона, прототип кристалічної решітки	oP16, NiAl ₃	hP5, Ni ₂ Al ₃	cP2, CsCl	cP4, AuCu ₃
Параметр решітки, нм	$a = 0,3589$	$a = 0,2887$	$a = 0,4034$ $c = 0,4894$ $c/a = 1,2132$	$a = 0,6611$ $b = 0,7366$ $c = 0,4812$
Щільність, г/см ³	3,96	4,77	5,87	7,29
Температура плавлення, К (°C)	1127 (854)	1406 (1133)	1911 (1638)	1658 (1385)
Теплота утворення (H_{0298}), Дж/моль	159	285	142	157,3
Коефіцієнт термічного розширення, 10 ⁻⁶ °C ⁻¹	-	-	15,1	8,5
Мікротвердість, МПа	6100 - 7700	8200 - 11200	5600 - 6200	4600 - 5600

1.2 Властивості та використання сплавів на основі NiAl

Завдяки високій температурі плавлення (1638 °C), низькій щільності (5,87 г/см³), високим показникам теплопровідності (76 В/м К), стійкості до окислення та великому модулю Юнга (240 ГПа) сплави на основі фази B2-NiAl здобули широкого використання при виготовленні деталей, що обертаються.

Відповідно до дослідження Darolia R., використання сплавів на основі $B2\text{-NiAl}$ замість нікелевих суперсплавів дозволило знизити вагу лопаток турбін високого тиску, як мінімум, на 40 % [16]. Наступна перевага над нікелевими суперсплавами – теплопровідність [17]. При використанні сплавів на основі $B2\text{-NiAl}$ для виготовлення двигунів, завдяки високій теплопровідності, спостерігається набагато більш рівномірний нагрів деталей двигуна, що забезпечує більш оптимальні режими роботи, зниження зносу та витрат пального [16]. В той самий час, сплав $B2\text{-NiAl}$, на відміну від інших високотемпературних сплавів та сплавів, що використовуються для захисних покриттів, має набагато більшу стійкість до окиснення. Це зумовило можливість його використання вже як покриття для лопаток турбін, які виготовлені із нікелевих суперсплавів [18].

Впорядкована об'ємноцентрована кубічна решітка фази $B2\text{-NiAl}$ забезпечує набагато вищу, у порівнянні з іншими інтерметалідами та керамічними високотемпературними матеріалами, здатність до низькотемпературної деформації [19]. $B2\text{-NiAl}$ розкриває всі свої властивості саме за високих температур, а за кімнатних температур виявляє посередню пластичність [20]. При нагріванні сплаву $B2\text{-NiAl}$ до температур порядку $200\text{ }^{\circ}\text{C}$ - $400\text{ }^{\circ}\text{C}$ відбувається перехід від крихкого до пластичного стану, за допомогою легуючих добавок цю температуру можливо підвищити до $700\text{ }^{\circ}\text{C}$. Легування може не тільки підвищити температуру в'язко-крихкого переходу, але й збільшує пластичність, а отже і тріщиностійкість сплаву [21].

Одна з найважливіших, поряд з термостійкістю, характеристик алюмінідів Ni, як $\beta\text{-NiAl}$ так і $\gamma\text{-Ni}_3\text{Al}$, є дуже висока стійкість до зовнішніх окисних середовищ, завдяки високому вмісту Al, який для $\beta\text{-NiAl}$ становить $\sim 50\text{ ат.}\%$, а для $\gamma\text{-Ni}_3\text{Al}$ $\sim 25\text{ ат.}\%$ [22]. Така стійкість до окиснення обумовила активізацію досліджень по використанню NiAl як високотемпературного захисного покриття [23, 24]. Велика кількість алюмінію у сплаві, звісно, призводить до утворення плівки оксиду алюмінію Al_2O_3 на його поверхні, після тривалого відпалу утворюються оксид NiO та шпінель NiAl_2O_4 . Проте, шпінель NiAl_2O_4 не

може існувати у термодинамічній рівновазі з NiAl, тому до сплаву додають Y, Hf, Zr та ін., що також позитивно впливає на стійкість до окислення [21].

Тобто, фаза B2-NiAl представляє собою багатообіцяючий інтерметалід, який може стати основою для високотемпературних матеріалів майбутнього.

1.3 Кристалічна будова фази B2-NiAl

Фаза B2-NiAl являє собою електронну сполуку з відношенням «валентний електрон/атом» – 3/2, яка відноситься до сімейства інтерметалідів з примітивною об'ємноцентрованою кубічною решіткою по типу CsCl, просторовою групою Pm3m. Сполука являє собою інтерметалід, що складається з двох взаємно-проникаючих примітивних кубічних ґраток алюмінію та нікелю [25]. На рис. 1.2 наведено схематичне зображення елементарної комірки фази B2-NiAl.

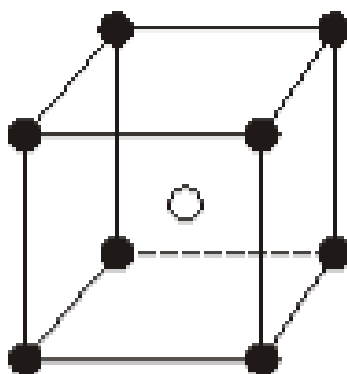


Рисунок 1.2 – Схематичне зображення елементарної комірки фази B2-NiAl

Однією з добре вивчених та загальновідомих особливостей фази B2-NiAl є перехід від твердого розчину заміщення до твердого розчину віднімання в межах області гомогенності. Якщо в сплаві менше 50 ат.% Al, то такий розчин буде розчином заміщення. У випадку, коли концентрація Al перевищує 50 ат.%, будуть утворюватися тверді розчини віднімання. Утворення розчинів віднімання обумовлено завеликою різницею між атомними радіусами Ni та Al, а також зміною електронної концентрації. Al не може втілитись у решітку Ni, що

призводить до росту кількості вакансій у підгратці Ni. Така велика різниця між структурою фази при відхиленні від стехіометричного складу має значний вплив на властивості фази B2-NiAl. Збільшення кількості вакансій в підрешітці Ni призводить до зміни таких фізико-механічних властивостей фази, як щільність, межа міцності, межа текучості, тепло- та електропровідність, твердість, а також параметрів дифузії [26].

Слід відмітити велику різницю між атомами системи Ni-Al. Нікель та алюміній сильно відрізняються як за електронною будовою, так і за атомними розмірами. Розглянемо електронну будову металів. Ni відноситься до VIIIA групи і є перехідним металом з високою електронегативністю, валентні орбіталі d^8s^2 . Al відноситься до IIIA групи і є неперехідним електропозитивним металом, валентні орбіталі s^2p^1 . Атомні радіуси також сильно відрізняються: для Ni $r_{\text{ат}} = 0,124$ нм, тоді як для Al $r_{\text{ат}} = 0,143$ нм. Така велика різниця між властивостями металів зумовлює доволі складну електронну будову: зв'язки вдовж напрямку $\langle 111 \rangle$ гібридизовані по $Ni d-Al p$ орбіталям, що призводить до формування сильного ковалентного зв'язку. В той же час, у напрямку $\langle 100 \rangle$ спостерігається нестача електронів, а в напрямку $\langle 111 \rangle$, навпаки збільшення їх кількості зумовлює слабкий іонний зв'язок між найближчими атомами. Ці напрямки зв'язків у фазі B2-NiAl переважають над металічним зв'язком [27]. Наявність змішаного ковалентного, іонного та металічного зв'язків обумовлює великий об'єм елементарної комірки, а також збільшення величини вектору Бюргерса, зменшує можливості передачі деформації через границі зерен, ускладнює взаємодію дислокацій між собою, а також з границями зерен. Саме такі особливості призводять до крихкості за низьких температур.

Період гратки NiAl сильно залежить від вмісту компонентів і має найбільше значення за стехіометричного та збагаченого алюмінієм складі. Для стехіометричної сполуки це 2,887 Å. При збільшенні вмісту нікелю до 50 ат.% - 60 ат.% період гратки зростає до 2,998 Å, а при зменшенні до 45% – 2,668 Å [28].

1.4 Дифузійні процеси в фазі $B2\text{-NiAl}$

Фаза $B2\text{-NiAl}$ вже давно привертає увагу науковців та дослідників, як потенціальною заміною іншому високотемпературному алюмініду нікелю – фазі $L1_2\text{-Ni}_3\text{Al}$ та матеріалам на його основі. Вища температура плавлення ($1638\text{ }^\circ\text{C}$ проти $1385\text{ }^\circ\text{C}$ у $L1_2\text{-Ni}_3\text{Al}$) свідчить про вищу стабільність надструктури типу $B2$.

Для розробки більшості технологічних операцій по обробці готових виробів, наприклад, гартування, необхідно чітко усвідомлювати характер міграцій атомів, росту зерен, фазових та структурних перетворень. Це підводить до необхідності глибокого вивчення дифузійних процесів, що відбуваються в матеріалі за різних температур та фазового або хімічного складу. Велику роль у формуванні фазової і мікрокристалічної структури також мають процеси впорядкування та розупорядкування, які на пряму залежать від дифузії дефектів у матеріалі [29].

Більшість досліджень дифузійних процесів в системі Ni-Al проводилась за допомогою метода дифузійних пар [30, 31]. Також встановлена велика різниця між дифузійною рухливістю атомів Ni та Al [30]. Сучасні дослідження з використанням радіоізотопного методу, а також методів молекулярної динаміки дозволили уточнити механізми за якими відбувається дифузія у фазі $B2\text{-NiAl}$ [6, 32].

Для фази $B2\text{-NiAl}$ характерна виражена зміна швидкості дифузії атомів Ni при відхиленні від стехіометричного складу, що викликано утворенням різних типів твердих розчинів. Як вже зазначено вище, це тверді розчини заміщення для концентрацій $\text{Al} < 50\text{ ат.}\%$ та віднімання для концентрацій $\text{Al} > 50\text{ ат.}\%$ [5]. В розчинах віднімання у підгратці Ni утворюються структурні вакансії Ni , що має призводити до збільшення коефіцієнту дифузії Ni [6].

Класичні досліди, проведені Hancock та McDonell у 1971 році, дозволили виявити, що мінімальна рухливість Ni спостерігається при концентраціях близьких до стехіометричних і збільшується зі збільшенням концентрації Ni , або Al [34]. Ці дані були підтверджені Helander та Agren за допомогою моделювання

у 1999 році [33]. Відповідне порівняння даних, отриманих за допомогою моделювання Helander та експериментальних даних Hancock, наведено на рис. 1.3, де лінії позначають дані, отримані Helander та Agren у порівняння з даними Hancock. Константа M додана, щоб розділити дані.

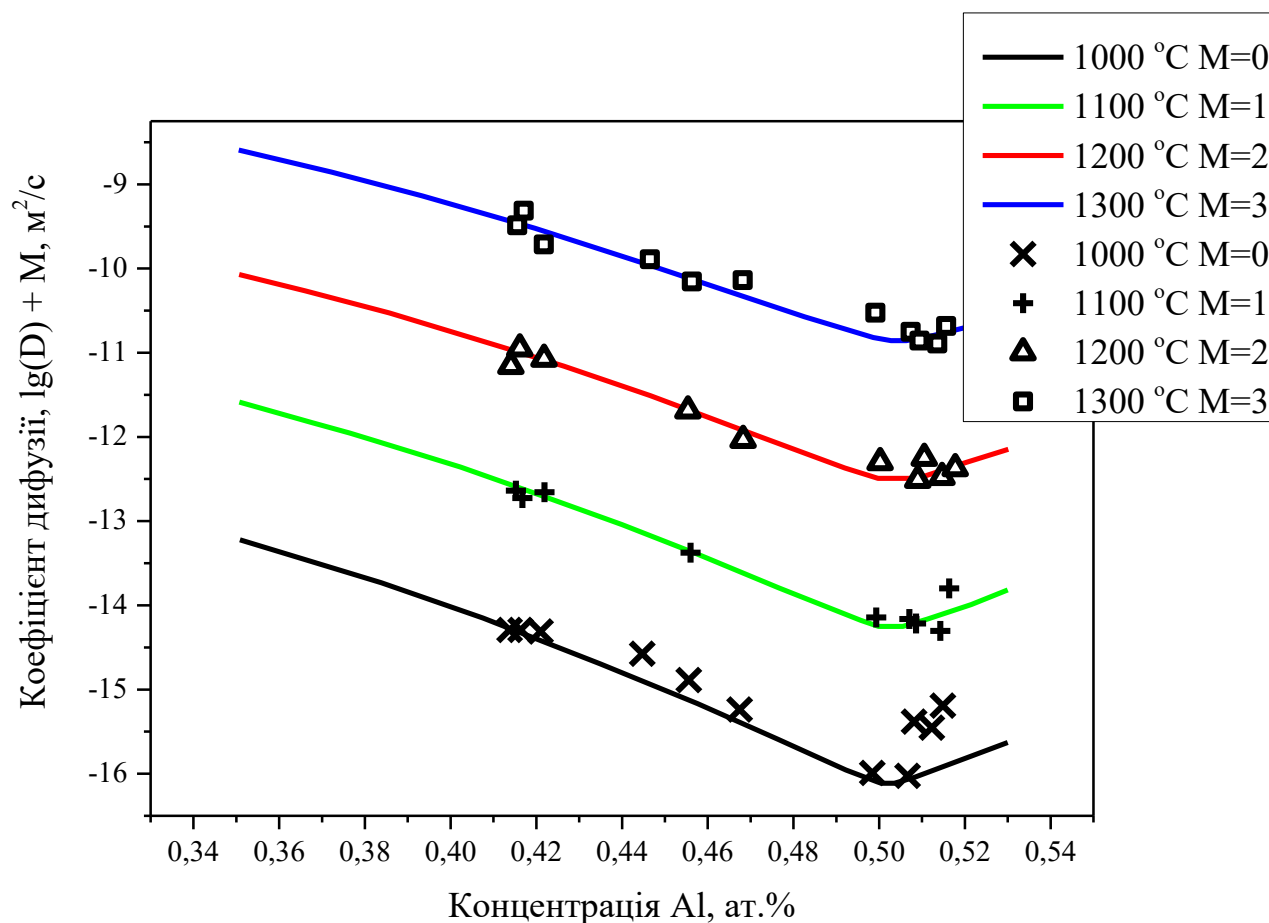


Рисунок 1.3 – Залежність коефіцієнта дифузії Ni в фазі B2-NiAl в залежності від концентрації Ni за температур 1000 °C, 1100 °C, 1200 °C, 1300 °C [33, 34]

Модель, розроблена Helander та Agren також знайшла підтвердження при порівнянні з експериментальними даними, що були отримані Shankar та Siegle у 1978 році [35]. Як і у випадку з даними, отриманими Hancock та McDonell, моделювання проведене Helander та Agren добре співвідноситься з результатами роботи [35]. Порівняння коефіцієнтів дифузії, отриманих Shankar та Siegle з результатами Helander та Agren, наведено на рис. 1.4.

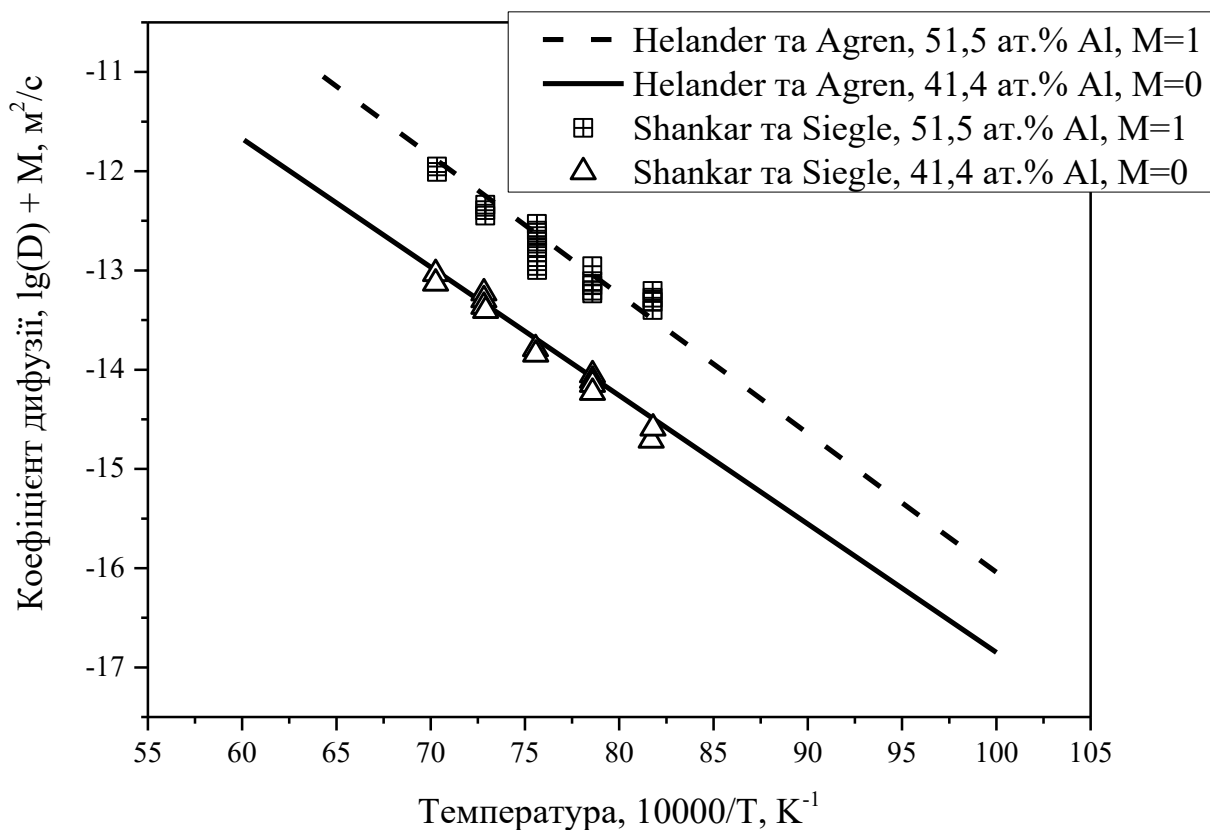


Рисунок 1.4 – Залежність коефіцієнта дифузії в $B2\text{-NiAl}$ в залежності від концентрації Al та температури [33, 35]

Як видно, експериментальні дані та дані моделювання співпадають. Тобто, збільшення або зменшення концентрації Ni однаково призводить до збільшення рухливості атомів Ni. Проте, у 2001 році Frank, Divinski, Sodervall та Herzig вирішили повторити експерименти Hancock та McDonell та дослідити дифузію в фазі $B2\text{-NiAl}$ за допомогою радіоізотопного методу для високотемпературних досліджень ($977\text{ }^\circ\text{C}$ – $1256\text{ }^\circ\text{C}$) та іонної мас-спектрометрії для низькотемпературних ($777\text{ }^\circ\text{C}$ – $927\text{ }^\circ\text{C}$). Frank встановив, що при зростанні концентрації Ni, а також при зростанні температури, коефіцієнт дифузії також збільшується. Також відмічено ділянки з відхиленням від лінійної залежності на залежності $\lg D - 1/T$ за високих температур та загинання графіка вгору [6]. Залежності коефіцієнта дифузії для різних температур та концентрацій, отримані Frank зображено на рис. 1.5 та рис. 1.6.

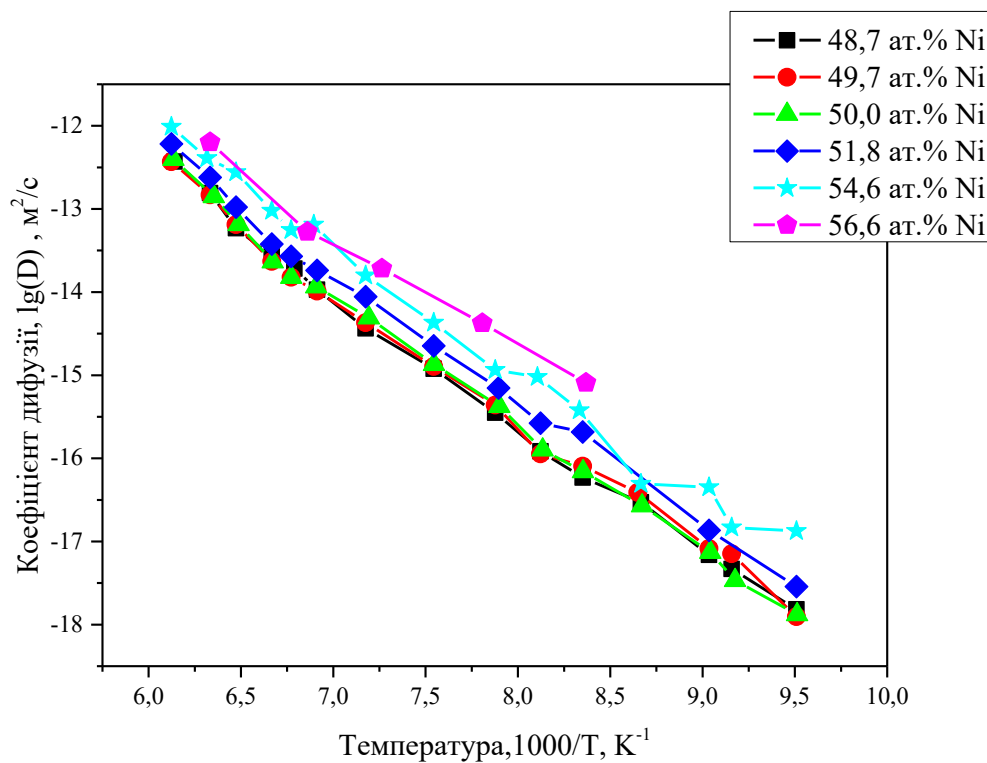


Рисунок 1.5 – Залежність коефіцієнта дифузії від температури для різних концентрацій Ni, отримані в роботі [6]

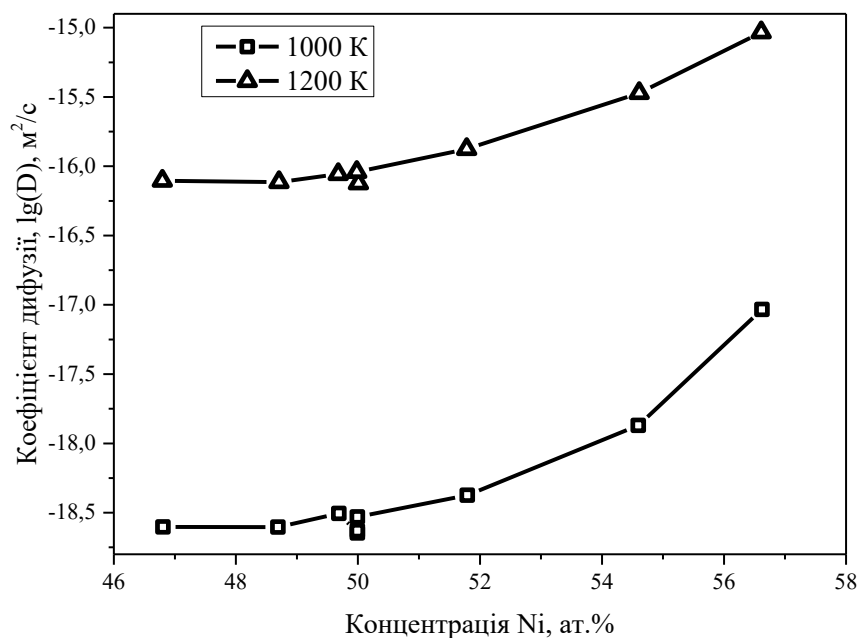


Рисунок 1.6 – Залежність коефіцієнта дифузії Ni в фазі B2-NiAl за температур 1000 K та 1200 K, отримані в роботі [6]

Як видно з рис. 1.5 та рис. 1.6, очікувано, коефіцієнт дифузії при зростанні концентрації Ni також збільшується. Проте, раніше встановленої Helander, Shankar та Hancock залежності коефіцієнта дифузії при зменшенні концентрації Ni не зафіксовано, що спростовує результати досліджень Hancock та інших [6]. Порівняння результатів Hancock та Frank наведено на рис. 1.7 в системі Ni_xAl_{1-x} , де x – концентрація Ni в ат. %.

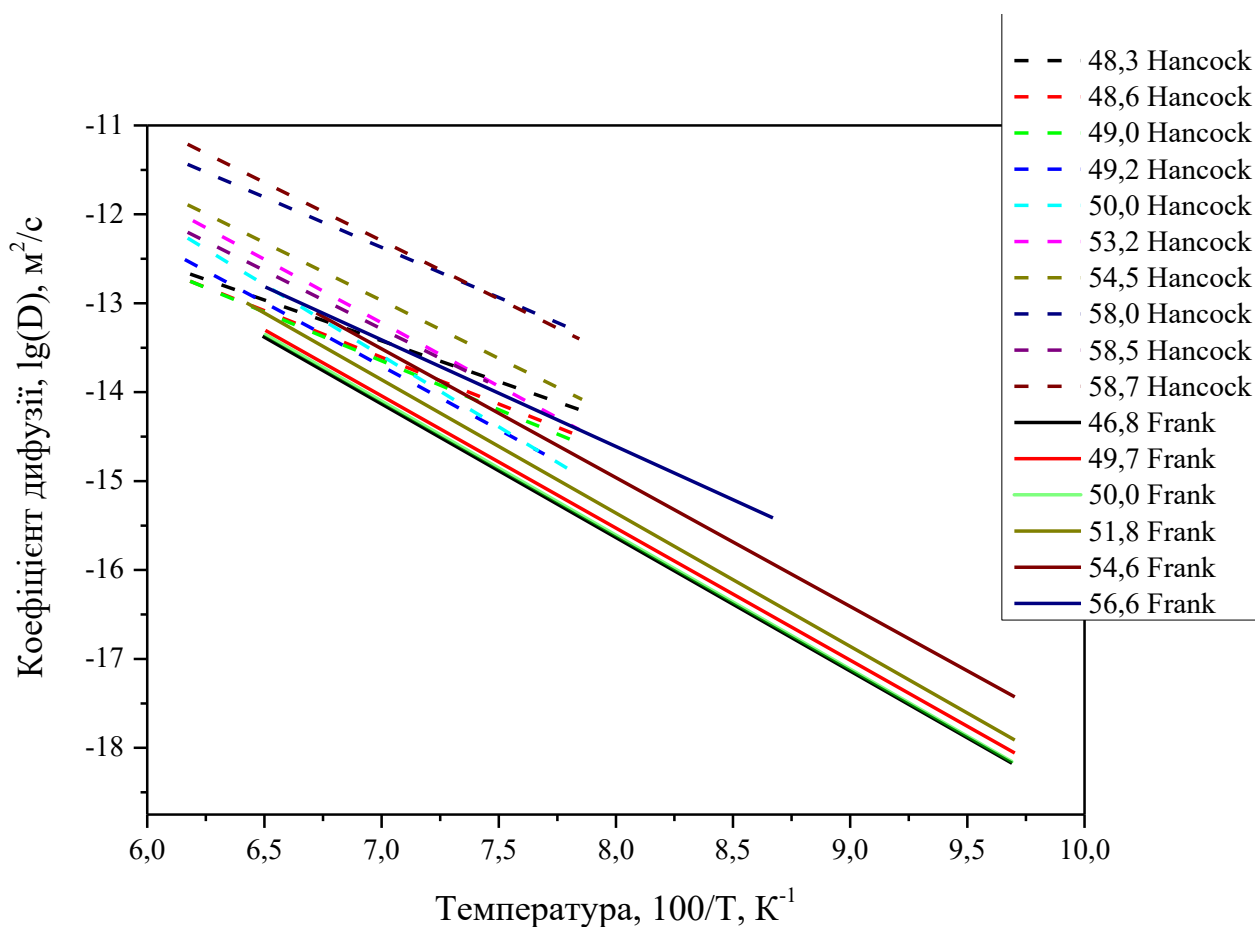


Рисунок 1.7 – Температурна залежність коефіцієнта дифузії Ni в фазі $B2-NiAl$ [6, 34]

Косицин також проводив дослідження, щодо впливу концентрації Ni на коефіцієнт дифузії у фазі $B2-NiAl$, результати його дослідження мають добру кореляцію з попередніми – зі зростанням концентрації Ni зростає коефіцієнт дифузії [5]. Результати, отримані Косициним наведені на рис. 1.8.

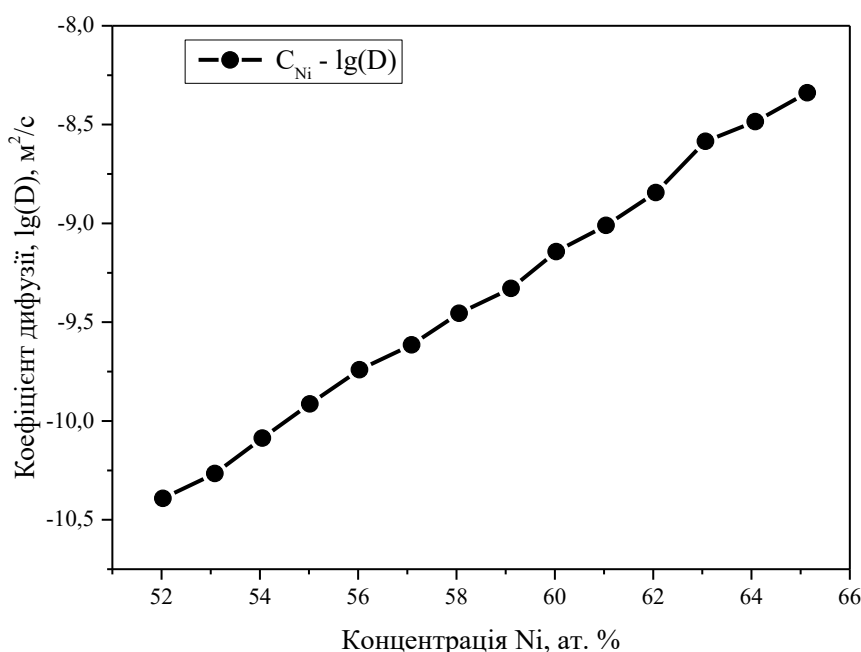


Рисунок 1.8 – Залежність коефіцієнта дифузії від концентрації Ні в фазі B2-NiAl, отримана в роботі [5]

1.4.1 Механізми дифузії в фазі B2-NiAl

Добре відомо, що дифузія в чистих металах відбувається за механізмом «найближчий сусід», тобто вакансія міняється місцем з найближчим сусіднім атомів. Цей механізм добре описує чисті метали, проте для таких високовпорядкованих фаз, як B2-NiAl, це означало би, що атом буде мінятися з вакансією іншої підгратки. Тобто, наприклад атом Al має зайняти місце у підгратці Ni [36]. Для опису дифузії у високовпорядкованих фазах, як B2-NiAl, поряд з механізмом «найближчий сусід» запропоновано наступні механізми:

- «6 стрибків» – досліджений у 1958 році E.W. Elcock та C.W. McCombi. За цим механізмом впорядкування кристалу під час руху вакансії порушується, проте після закінчення циклу, порядок повністю відновлюється. Особливо гарно цей механізм описує дифузію у стехіометричних сполуках B2-NiAl за низьких температур [37, 38];

- «наступний-найближчий-сусід» – досліджений у 1975 році А. Lutze-Birk та Н. Jacobi. В цьому випадку атоми мігрують лише по своїй підрешітці, не порушуючи загального впорядкування фази [39];

- «анті-структурний міст» – досліджений у 1993 році С. Р. Као, Y. A. Chang [40];

- «потрійний дефект» – запропонований Frank у 2001 році [6].

Найбільш комплексно механізми дифузії та її внесок у загальну дифузію Ni в B2-NiAl описано у роботі Frank в 2001 році. Frank для початку порівнює механізми «6 стрибків» та «наступний-найближчий-сусід». Показано, що не дивлячись на меншу енергію активації механізму «наступний-найближчий-сусід», яка складає ~2,1 еВ проти ~3 еВ для механізму «6 стрибків», ентропія міграції для «наступний-найближчий-сусід» $S_{nnn}^m \cong -3k$, а для «6 стрибків» $S_{6JC}^m \approx 2,5k$, де k – константа Больцмана. Така величезна різниця між ентропією міграції повністю виключає можливість дифузії за механізмом «наступний-найближчий-сусід» [6].

«Анті-структурний міст» за своїм принципом оперує анті-структурними атомами Ni, що утворюються лише при концентраціях Ni > 50 ат.%. Не зважаючи на найнижчу серед розглянутих механізмів енергію активації, що рівна 1,73 еВ, «анті-структурний міст» вносить вагомий вклад у дифузію в фазі B2-NiAl лише за концентрації Ni > 55 ат.%, тому в рамках даного дослідження не розглядається [6, 40].

Нарешті, механізм запропонований Frank у 2001 році – «потрійний дефект». У дослідженні Frank показано, що ентальпія активації не залежить від концентрації і залишається постійною для концентрації Ni 46 ат.% - 53 ат. %. Тоді дослідниками було висунуто гіпотезу, що дифузія забезпечується системою дефектів, що утворюються в кристалі. Було досліджено 3 різні варіанти:

- пара вакансій $B_{Al} + B_{Ni}$, енергія утворення 2,46 еВ;
- пара анті-структурних атомів $Ni_{Al} + Al_{Ni}$, енергія утворення 2,54 еВ;
- потрійний дефект $2B_{Ni} + Ni_{Al}$, енергія утворення 2,05 еВ.

Як бачимо, найменшу енергію утворення мають потрійні дефекти, що складаються з двох вакансій у підгратці Ni та анти-структурного атому Ni у підгратці Al. Розрахована Frank енергія активації для механізму «потрійного дефекту» складає 3,12 eV, що добре співвідноситься з експериментальними даними [6].

1.5 Методи комп'ютерного моделювання

Сучасні методи комп'ютерного моделювання дозволяють з високою точністю досліджувати поведінку, навіть, багатокomпонентних систем за будь-яких температур. Основними методами моделювання дифузійних процесів у інтерметалідах є: молекулярна динаміка, молекулярна статика та методи Монте-Карло [4, 6, 41-43].

1.5.1 Метод молекулярної статички

В методі молекулярної статички задача зводиться до знаходження координат усіх атомів в системі за заданими граничними умовами, для чого знаходять мінімальну потенціальну енергію, як різницю між внутрішньою та зовнішньою енергіями. Сила взаємодії між атомами замінюється на, наприклад, суму потенціалів зв'язку між сусідніми атомами, і підбирається таким чином, щоб потенціальна енергія була мінімальною. Результатом роботи методу є кінцевий стан системи, коли усі частинки знаходяться у максимально енергетично вигідних позиціях. Метод молекулярної статички використовується для обчислення енергій активації, ентропії міграції, періоду гратки тощо [4, 6, 41, 42].

1.5.2 Методи Монте-Карло

В методах Монте-Карло основним принципом роботи є генерація випадкової величини. Атоми знаходяться строго у вузлах кристалічної гратки,

вони переміщуються між вузлами кристалічної ґратки стрибкоподібно і лише тоді, коли це призведе до зменшення енергії системи. Спочатку створюється модель фізичного процесу, в якій усі події розділяються на систему елементарних подій, для яких можна знайти вірогідність настання того чи іншого стану. Методи Монте-Карло активно використовуються для досліджень великих систем, довготривалих процесів, завдяки набагато меншим затратам часу у порівнянні з молекулярною динамікою. Основним недоліком методів є збільшення похибки зі збільшенням температури, тому що не враховуються коливання атомів у вузлах кристалічної ґратки [4, 6, 43].

1.5.3 Метод молекулярної динаміки

В молекулярній динаміці кожен атом представлений як об'єкт, що підпорядковується законам Ньютона. Основною задачею молекулярної динаміки є встановлення стану системи (позицій атомів) після проходження постійного часу t . Розрахунок починається з завдання початкових позицій та прискорень атомів. Сила, що прикладена до кожного атому описується другим законом Ньютона:

$$\frac{d^2\vec{r}_i}{dt^2} = \frac{\vec{F}_i}{m_i}, \quad (1.1)$$

де \vec{r}_i та m_i – позиція та маса i -го атома, відповідно;

t – крок по часу, що залежить від того, як швидко змінюється стан системи, чим швидше рухаються атоми, наприклад, збільшується температура, тим менше крок по часу;

\vec{F}_i – сила, що прикладена до i -ої частинки, на кожному кроці залишається постійною [42].

На кожному кроці симуляції обчислюється рух кожної частинки в системі, що дозволяє прослідкувати еволюцію системи та перехід її до врівноваженого стану, який може бути прогнозований за допомогою молекулярної статистики.

Молекулярна динаміка використовується для моделювання дифузійних процесів, розрахунку коефіцієнтів дифузії, теплопровідності, електропровідності тощо [41]. Основним недоліком методу молекулярної динаміки є великі витрати часу на моделювання.

Комп'ютер не може зберігати у пам'яті дуже довгі числа, тому при обчисленні енергії відбувається округлення величин. На кожному кроці, а так як моделювання за допомогою молекулярної динаміки відбувається для доволі великих проміжків часу від декількох до сотень наносекунд, то кроків можуть бути десятки мільйонів, накопичуються похибки округлення. Для досліджуваної системи це означає, в основному, збільшення внутрішньої енергії та самонагрів. Для контролю таких відхилень від очікуваної поведінки системи використовуються так звані ансамблі, *NVT* та *NPT*. Використання ансамблю *NVT* означає, що кількість частинок в системі N , об'єм системи V та температура T залишаються незмінними. Ансамбль *NPT*, як і *NVT* підтримує постійними температуру T та кількість частинок N , але замість об'єму постійним залишається тиск у системі P .

Найважливішим параметром у симуляції методом молекулярної динаміки є потенціальна енергія взаємодії V_i . Ця величина враховує всі можливі взаємодії між двома атомами і розраховується на кожному кроці для кожної частинки. Для розрахунку V_i необхідно знати функцію, за якою вона змінюється. Набір параметрів та самі функції розробляються дослідниками у вигляді так званих «потенціалів». Найбільш поширеним наразі є МЕАМ-потенціал (Modified Embedded Atom Model), розроблений на базі ЕАМ-потенціалу (Embedded Atom Model) Баскесом [44, 45].

ЕАМ-потенціал для двокомпонентної системи включає такі функції: 3 функції парної взаємодії (А-А, В-В, А-В), дві функції занурення для кожного сорту атомів та, відповідно, дві функції розподілу електронних хмар [46]. Загальна енергія для парної взаємодії записується як:

$$E = \sum_{ij} V(r_{ij}) + \sum_i F(\rho_i), \quad (1.2)$$

$$\rho_i = \sum_i \rho(r_{ij}) \quad (1.3)$$

Основною відмінністю MEAM потенціалу від EAM є форма другого доданку (1.3):

$$\rho_i = \sum_j \rho(r_{ij}) + \sum_{jk} f(r_{ij})f(r_{ik})g(\cos(\theta_{ijk})) \quad (1.4)$$

Тобто, окрім вищезазначених 7 функцій, у MEAM потенціалі враховується кут зв'язку між атомами. Як результат, такі потенціали можуть описувати направлені зв'язки, наприклад ковалентні [44, 45].

Поряд з EAM та MEAM потенціалами існують також АТМ (Axilrod-Teller-Muto) потенціал, що оперує системами із 3 частинок, як і потенціал розроблений J. Tersoff і названий в його честь Tersoff_{1/2}.

Висновки до розділу 1

1) Матеріали на основі інтерметалідної впорядкованої фази *B2-NiAl* є перспективними кандидатами для створення жароміцних сплавів та покриттів для виробів, що працюють в агресивних середовищах і екстремальних умовах.

2) Дифузійні процеси чинять істотний вплив на формування структурно-фазових станів і процес впорядкування в сплавах на основі *NiAl*, а отже можуть впливати на їхні функціональні характеристики. Параметри самодифузії у впорядкованій фазі *B2-NiAl* в різних температурних і концентраційних інтервалах не можна вважати такими, що встановлені повною мірою.

3) Найбільш точним та перспективним методом комп'ютерних досліджень для виявлення параметрів дифузійних процесів у впорядкованій фазі *B2-NiAl* є методи молекулярної динаміки з використанням напівемпіричних MEAM-потенціалів.

2 МАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИКА ДОСЛІДЖЕНЬ

В даній роботі досліджено вплив температури та концентрації Ni на процеси дифузії у впорядкованій фазі B2-NiAl. Дослідження проводились за допомогою комп'ютерного моделювання методами молекулярної динаміки. Програмне забезпечення для моделювання – LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) [47], використовуваний потенціал міжатомної взаємодії – MEAM. Коефіцієнти дифузії розраховувались, зважаючи на отримані протягом обчислювального експерименту значення середньоквадратичних відхилень атомів.

2.1 Молекулярнодинамічне моделювання за допомогою LAMMPS

Для молекулярнодинамічного моделювання процесів дифузії існує велика кількість різноманітного програмного забезпечення, що розповсюджуються як у вільному доступі, так і на платній основі. В рамках даної роботи використовується фреймворк LAMMPS, розроблений Steve Plimpton, Aidan Thompson, Stan Moore, Axel Kohlmeyer. Наразі LAMMPS розробляється Sandia National Laboratories та Temple University і розповсюджується за ліцензією GNU General Public License, тобто безкоштовно [47].

Програмне забезпечення LAMMPS для своєї роботи потребує 2 основні файли. В першому записаний потенціал взаємодії будь-якого сучасного виду: EAM, MEAM, ATM, Tersoff тощо. Другий файл – це основний скрипт, в якому задаються усі параметри моделювання: крок по часу, кількість кроків, періоди кристалічної будови, температура, час релаксації, розмір моделі, кількість і типи дефектів структури, тип ансамблю. Результат роботи програми зберігається у вигляді файлу з розширенням .csv, в якому записані крок, температура та середньоквадратичне відхилення для кожного сорту атомів по осям x, y, z та загальне відхилення по всім осям, яке і використовується в даному дослідженні [48, 49].

Після запуску скрипта у консолі, якщо програмний код є коректним, дослідник отримає інформацію про успішне створення моделі, кількість обчислень за секунду, загальну тривалість симуляції у наносекундах, завантаженість системи, кількість створених атомів та температуру. Після цього програмне забезпечення LAMMPS в автоматичному режимі буде видавати в консолі дані по кожному кроку моделювання: температуру, тиск в системі. Після завершення процесу моделювання або виникнення критичної помилки консоль буде автоматично закрита, а моделювання припиниться [49].

2.2 Параметри молекулярнодинамічного моделювання

Для надійного молекулярнодинамічного моделювання необхідно передати в скрипті коректні дані про систему, яка розглядається. Найперше – це підбір правильного потенціалу. В даній роботі використовується MEAM потенціал, тому що, як зазначено вище, в фазі *B2-NiAl* наявні направлені ковалентні зв'язки між атомами Ni та Al, що добре описуються саме MEAM-потенціалом.

Наступним важливим параметром для симуляції є крок по часу dt . Він відповідає за проміжок реального часу, який моделюється за один крок симуляції. Тобто, буде змодельоване $N \times dt$ секунд реального часу. Для розглянутих у роботі температур оптимальним виявився крок по часу, що рівний 9×10^{-15} с. Загальна тривалість моделювання складає 2240000 кроків по часу. Наступним важливим параметром є період ґратки фаз Ni, Al та фази NiAl. Частіше всього, в потенціалі записані періоди ґраток структур, для яких розроблено потенціал, їх і необхідно використовувати. Для обраного потенціалу це: $a_{Al} = 2,873727 \text{ \AA}$, $a_{Ni} = 3,91737 \text{ \AA}$, $a_{NiAl} = 2,929454 \text{ \AA}$.

Також необхідно задати температуру і ансамбль для її підтримки. В даній роботі моделювання дифузійних процесів в системі Ni-Al проведено в температурному інтервалі 1600 K - 1800 K (1327 °C - 1527 °C). Для підтримання температури в системі використовувався *NPT*-ансамбль. Використання *NPT*-ансамблю зумовлено тим, що при моделюванні твердих тіл об'єм тіла може

змінюватись і, щоб система мала змогу підлаштовуватись до змін розмірів тіла, вводиться постійний тиск. Таким чином, тиск в системі буде залишатися незмінним, тоді коли об'єм може змінюватись.

Проведено серію обчислювальних дослідів з системами розміром 12x12x12 та 14x14x14 атомів. Так як моделюється не стехіометрична система, а збіднена на Ni, концентрація Ni складала: 45 ат.%, 46 ат.% та 47 ат.%. Для реалізації в моделі даної концентрації створено відповідні вакансії у підгратці Ni шляхом видалення випадкових атомів. Для підрахунку необхідної кількості видалених атомів використовувалась класична пропорція:

$$C_{Ni} = \frac{N_{Ni}}{N_{заг}} \times 100\% \quad (2.1)$$

Таким чином, для системи розміром 12x12x12 атомів для отримання концентрації Ni 45 ат.% необхідно видалити 314 з 1728 атомів, для концентрації 46 ат.% – 256, а для концентрації 47 ат.% – 196. Для системи розміром 14x14x14 атомів з метою досягнення бажаного концентраційного відношення необхідно видалити, відповідно, 499, 406, 311 атомів. Номера атомів, що будуть видалені генерувалися випадково і не повторювались, так як при попередніх експериментах було встановлено, що ізольовані вакансії, розміщені з дискретним кроком не забезпечують активацію дифузійних процесів. Це пов'язано з тим, що в фазі B2-NiAl дифузія відбувається за механізмом потрійного дефекту [6].

На систему, що моделюється, накладено періодичні умови Борна-Кармана за всіма трьома осями x, y, z. Це означає, що будь-який атом, що вийде за границю симуляційної комірки, буде переміщений на протилежний бік кристалу. Періодичні умови Борна-Кармана дозволяють на фактично невеликих системах досліджувати дифузійні характеристики, притаманні масивним матеріалам [50].

Для забезпечення проходження релаксації в новоствореній системі задано 5000 кроків релаксації, за які система врівноважується, тобто стабілізується за енергією і температурою. Ці кроки релаксації не враховуються у кінцевих даних, що генеруються при роботі LAMMPS і не вносять похибки у розрахунки.

2.3 Обробка результатів роботи LAMMPS

Так як в даному випадку моделюванню піддається кристалічний метал, то командою *units* встановлюються значення *metal*. Це означає, що LAMMPS буде використовувати такі величини:

- маса в грам/моль;
- відстань в Ангстремах;
- енергія в еВ;
- температура в Кельвінах;
- тиск в бар [51].

Для того, щоб отримати значення середньоквадратичного відхилення для частинок Ni та Al, необхідно використати команду *compute msd*. LAMMPS записує відхилення по трьом осям та загальний вектор відхилення, тобто dx , dy , dz та загальне середньоквадратичне відхилення, яке буде використовуватися для розрахунку дифузійних характеристик. Для того, щоб підрахувати загальне середньоквадратичне відхилення використовується стандартна формула для довжини вектора у тривимірному просторі:

$$msd_{zag} = (dxdx+dydy+dzdz) \quad (2.2)$$

Отриманий результат буде в стандартних одиницях відстані в квадраті – тобто Å^2 [52].

Для того, щоб отримати кінцеве значення коефіцієнта дифузії необхідно підрахувати реальний час у секундах, що пройшов для кожного кроку:

$$t = N \times dt \quad (2.3)$$

dt , як вже зазначалось вище, складає 9×10^{-15} с.

Наступним кроком підраховуються суми по часу, середньоквадратичним відхиленням, їх добутком та квадрату часу:

$$sx = \sum_{i=32000} t_i \quad (2.4)$$

$$sy = \sum_{i=32000} msd_i \quad (2.5)$$

$$sxy = \sum_{i=32000} t_i \times msd_i \quad (2.6)$$

$$sxx = \sum_{i=32000} t_i^2 \quad (2.7)$$

На наступному етапі розраховується коефіцієнт дифузії, використовуючи отримані значення sx , sy , sxy , sxx :

$$D = \frac{6x(N \times sxy - sx \times sy)}{N \times sxx - sx^2} \times 10^{-15} \quad (2.8)$$

В даній роботі $N = 32000$, так як це обмеження Excel на кількість точок у графіку. Для первинної оцінки результатів експерименту використовувалась побудова графіків в Excel.

Перевіримо, чи співпадає розмірність в (2.8) з розмірністю коефіцієнта дифузії ($\text{м}^2/\text{с}$):

$$\frac{\text{Å}^2 \times \text{с} - \text{Å}^2 \times \text{с}}{\text{с}^2 - \text{с}^2} = \frac{\text{Å}^2 \times \text{с}}{\text{с}^2} = \frac{\text{Å}^2}{\text{с}} \quad (2.9)$$

Як видно, розмірність співпадає.

Таким чином, підраховано коефіцієнти дифузії для кожного обчислювального експерименту і зображено результати у вигляді графіків за допомогою програмного забезпечення OriginLab OriginPro 9.1.

Висновки до розділу 2

1) Молекулярнодинамічне моделювання проводилось за допомогою програмного забезпечення LAMMPS.

2) Для забезпечення найвищої точності досліджень використовувався напівемпіричний MEAM-потенціал, який забезпечує коректне моделювання наявних в фазі B2-NiAl ковалентних напрямлених зв'язків.

3) Параметри молекулярнодинамічного моделювання підбрано відповідно до використовуваного потенціалу, таким чином, щоб максимально зменшити можливі похибки результатів моделювання.

3 ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНА ЧАСТИНА

Для визначення коефіцієнтів самодифузії Ni за вакансійним механізмом в фазі B2-NiAl проведено 3 серії обчислювальних дослідів – 2 з використанням комірки моделювання розміром 12x12x12 атомів (17 та 26 обчислювальних експериментів, відповідно) та одна серія дослідів з використанням комірки 14x14x14 атомів (15 обчислювальних експериментів). Вочевидь, чим більшою є область моделювання, тим більш точними та наближеними до реальних будуть отримані дифузійні характеристики в досліджуваних матеріалах. Проте необхідно враховувати ресурсоемність процесу моделювання систем, що складаються з великої кількості атомів. Наприклад, якщо система розміром 12x12x12 атомів в разі еквіатомного вмісту атомів Ni та Al всього у своєму складі має 3456 атомів, то для систем розміром 14x14x14 ця величина збільшується вже до 5488 атомів. Так як на кожному кроці моделювання відбувається розрахунок параметрів взаємодії кожної частинки, що входить до складу досліджуваної системи, а тривалість моделювання є сталою (20 нс), витрати реального часу зростають приблизно в 1,5 рази.

Також для кожної системи випадково задавалися вихідні положення вакансій, що дозволяє отримати статистично набагато більш точні дані. В перших експериментах, коли вакансії розміщувались з певним кроком і були абсолютно рівномірно розподілені за об'ємом, активації дифузійних процесів за такий короткий проміжок часу не спостерігалось взагалі, що пов'язано з тим, що не утворювались потрібні комплекси вакансій, необхідні для проходження дифузії у впорядкованій фазі B2-NiAl [6].

3.1 Вплив температури на середньоквадратичне відхилення та коефіцієнт дифузії атомів Ni у фазі B2-NiAl

В даному дослідженні основним фактором, що визначає коефіцієнт дифузії, є середньоквадратичне відхилення атомів (*MSD*) Ni від початкового положення.

Тобто, підраховується загальна відстань, на яку сумарно мігрували атоми Ni в фазі $B2$ -NiAl в процесі моделювання. Як видно з рис. 3.1 – 3.3 незалежно від концентрації Ni з підвищенням температури рухливість атомів Ni значно збільшується, особливо за температур близьких до температури плавлення, яка складає $1638\text{ }^{\circ}\text{C}$ (1911 K).

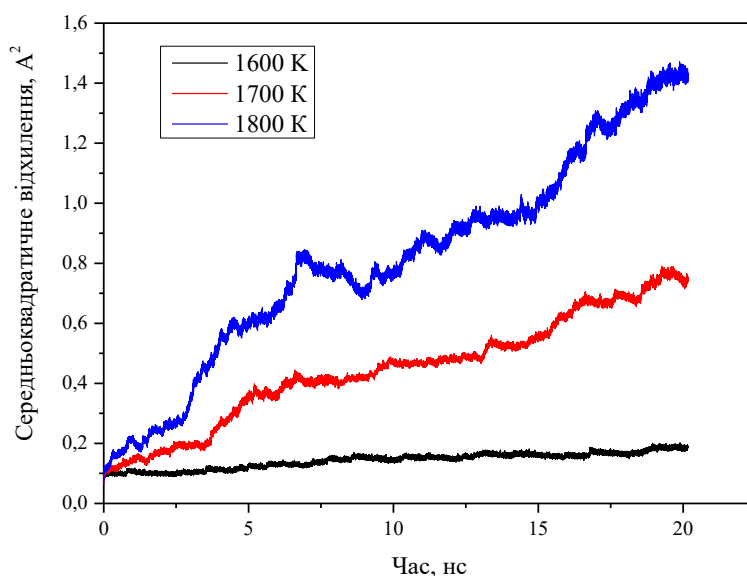


Рисунок 3.1 – Залежність середньоквадратичного відхилення атомів Ni у фазі $B2$ -NiAl з концентрацією Ni 45 ат.% від часу

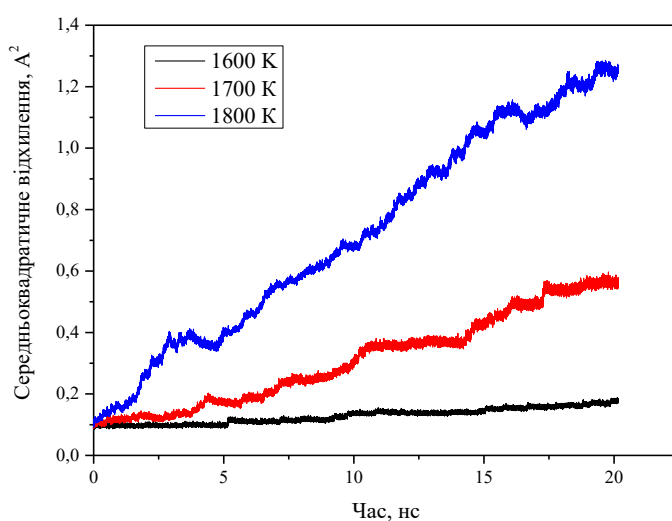


Рисунок 3.2 – Залежність середньоквадратичного відхилення атомів Ni у фазі $B2$ -NiAl з концентрацією Ni 46 ат.% від часу

Використана загальна тривалість молекулярнодинамічного моделювання, що складала 20 нс, не дозволяє досліджувати перебіг дифузійних процесів за відносно низьких температур – не фіксуються виражені дифузійні зміщення досліджуваних атомів відносно початкових положень. Цей ефект добре простежується з рис. 3.1 – 3.3 для температури 1600 К. З ростом температури, загалом, середньоквадратичне відхилення збільшується.

Можна бачити, що зі збільшенням концентрації Ni в досліджуваній системі, зменшенням кількості вакансій і наближенням хімічного складу досліджуваної фази до еквіатомного дифузійна рухливість атомів Ni помітно зменшується. Це добре узгоджується з даними, отриманими в роботі [6], в якій розглядається механізм дифузії, за типом «потрійний дефект». За даного механізму основний внесок в розвиток дифузійних процесів вносять пара вакансій Ni та антиструктурний атом Ni у підгратці Al впорядкованої фази B2-NiAl.

Зменшення середньоквадратичного відхилення, зафіксоване для фази B2-NiAl з концентрацією 47 ат.% Ni та 53 ат.% Al, пов'язане, певно, з недостатньою кількістю вакансій у підгратці Ni, їхньою розрізненістю та великим часом міграції, що необхідний для утворення комплексу з трьох вищезазначених дефектів.

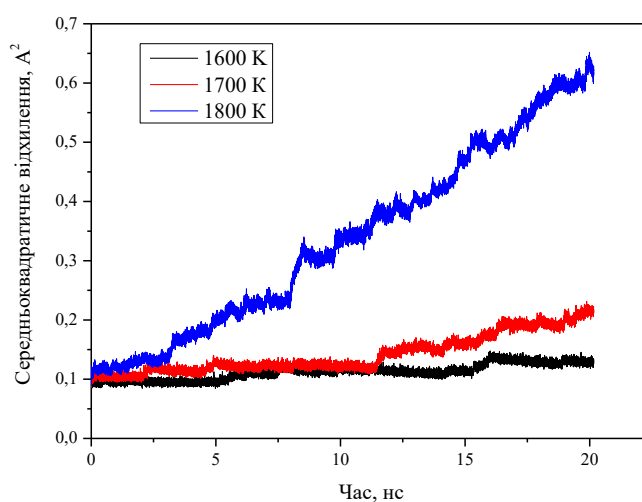


Рисунок 3.3 – Залежність середньоквадратичного відхилення атомів Ni у фазі B2-NiAl з концентрацією Ni 47 ат.% від часу

Як вже зазначалось вище, коефіцієнти дифузії розраховувались на основі середньоквадратичних відхилень атомів, досягнутих в процесі молекулярнодинамічного моделювання. Тобто, чим вищим є кінцеве значення MSD по завершенню симуляції, тим більшими будуть коефіцієнти дифузії для відповідних систем. Температурні залежності в координатах Арреніуса розрахованих коефіцієнтів самодифузії Ni у впорядкованій фазі $B2-NiAl$ представлено на рис. 3.4 – 3.6.

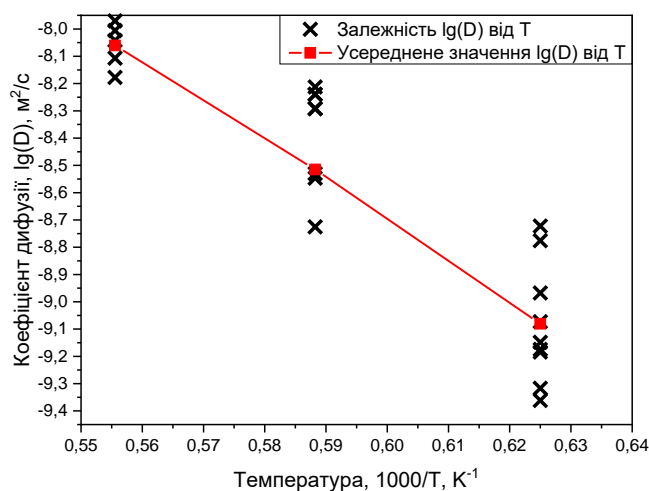


Рисунок 3.4 – Температурна залежність коефіцієнта самодифузії Ni в фазі $B2-NiAl$ з концентрацією Ni 45 ат.% у координатах Арреніуса

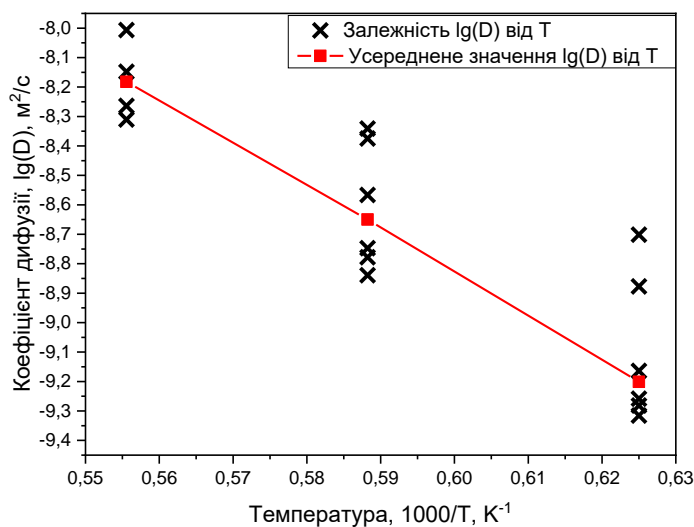


Рисунок 3.5 – Температурна залежність коефіцієнта самодифузії Ni в фазі $B2-NiAl$ з концентрацією Ni 46 ат.% у координатах Арреніуса

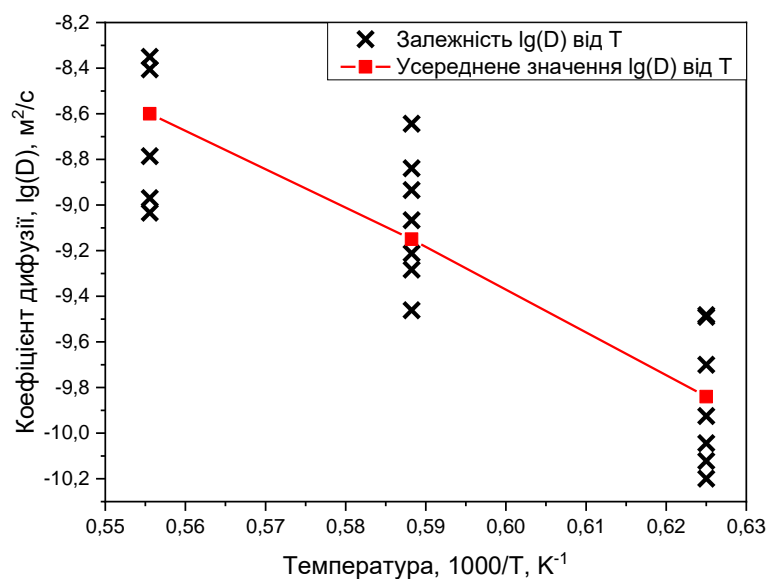


Рисунок 3.6 – Температурна залежність коефіцієнта самоїфузії Ні в фазі $B2-NiAl$ з концентрацією Ні 47 ат.% у координатах Арреніуса

При усередненні значень усіх обчислювальних експериментів для всіх температур спостерігається лінійна залежність коефіцієнта дифузії від температури в координатах Арреніуса, що повністю співпадає з теоретичними даними, а також даними, отриманими в роботах [6, 33-35].

3.2 Концентраційна залежність коефіцієнта дифузії Ні в фазі $B2-NiAl$

Найбільший інтерес представляє дослідження впливу концентрації Ні у впорядкованій фазі $B2-NiAl$ на його дифузійні характеристики. Автори робіт [6, 33-35] акцентують увагу саме на вираженій концентраційній залежності параметрів дифузійних процесів за концентрацій Ні не нижче 46 ат.% - 47 ат.%. Проте кристалічні структури, збуднені на Ні, також викликають інтерес для досліджень, адже, як показано авторами роботи [5], з метою прискорення дифузійних процесів в кристалічній ґратці впорядкованої фази на місця атомів Ні можна впроваджувати, наприклад, атоми Si.

Підтверджуючи дані, отримані в роботах [33-35], можна обґрунтовано стверджувати, що коефіцієнт дифузії Ni має виражену концентраційну залежність не тільки для систем, збагачених Ni, а й для систем, збіднених на Ni. Необхідно відмітити, що як і в даному випадку, в дослідженні [33] використовувалось комп'ютерне моделювання, а в роботі [6], автори якої спростовують результати отримані в роботах [33-35], дослідження проводились на реальних зразках за допомогою сучасних методів фізичного матеріалознавства.

З рис. 3.7 – 3.9 видно, що зі збільшенням концентрації Ni у фазі B2-NiAl коефіцієнти дифузії значно зменшуються саме за концентрації 47 ат.%, тоді коли системи з 45 ат.% та 46 ат.% Ni характеризуються приблизно рівними коефіцієнтами самодифузії Ni за відповідних температур.

Таким чином, можна зробити висновок, що отримані результати мають добре узгодження з результатами роботи [6], так як за концентрацій Ni, менших 46 ат.%, коефіцієнти дифузії майже не збільшуються. В той самий час, у відповідності до попередніх досліджень [33-35], при збільшенні концентрації Ni та її наближенні до стехіометричного значення, коефіцієнти дифузії значно зменшуються.

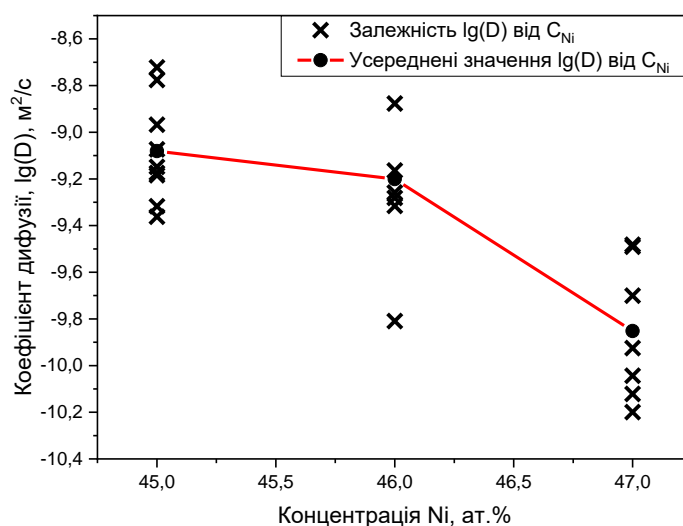


Рисунок 3.7 – Концентраційна залежність коефіцієнта дифузії Ni у фазі B2-NiAl за температури 1600 К

Як і у випадку отриманого найменшого значення середньоквадратичного відхилення атомів Ni у впорядкованій фазі $B2\text{-NiAl}$ з концентрацією Ni 47 ат.%, так і у випадку розрахованих коефіцієнтів дифузії, найменші значення зумовлені набагато меншою кількістю вакансій у порівнянні з іншими досліджуваними системами.

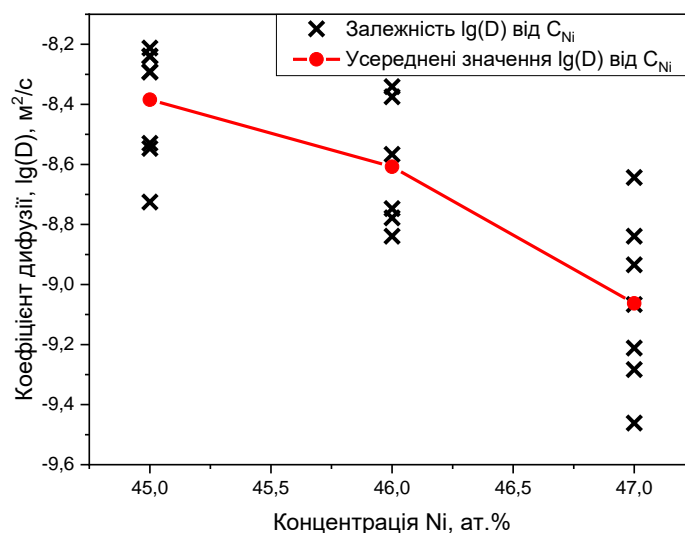


Рисунок 3.8 – Концентраційна залежність коефіцієнта дифузії Ni у фазі $B2\text{-NiAl}$ за температури 1700 К

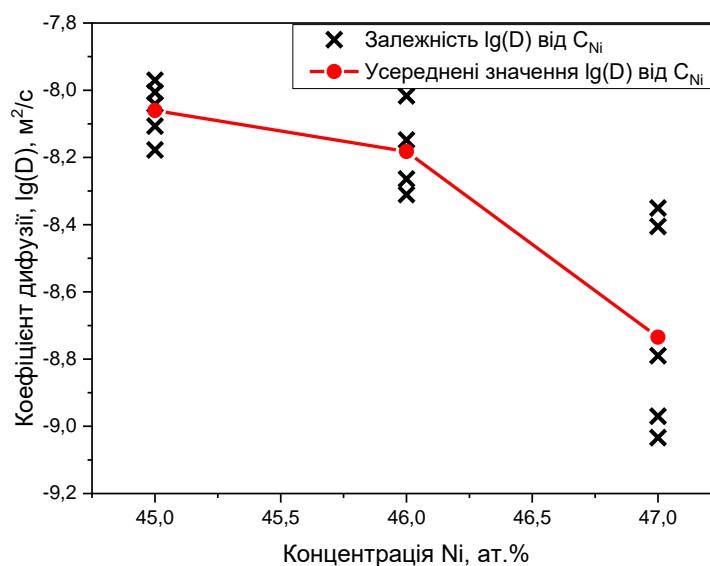


Рисунок 3.9 – Концентраційна залежність коефіцієнта дифузії Ni у фазі $B2\text{-NiAl}$ за температури 1800 К

На рис. 3.10 наведено порівняння даних, отриманих при моделюванні дифузійних процесів у фазі $B2\text{-NiAl}$ методами молекулярної динаміки, з даними Hancock [34] та Frank [6]. Так як моделювання за низьких температур не проводилось, для температур нижче 1600 К дані отримані методом екстраполяції лінійних залежностей коефіцієнта дифузії від температури для відповідних концентрацій. Добре видно, що отримані коефіцієнти дифузії менше, ніж в реальних матеріалах, що можливо зумовлено наступними причинами:

- моделювання проводилось на монокристалах, в яких наявні тільки вакансії і ніяких інших дефектів;
- реальні матеріали – набагато більш дефектні полікристали, в яких наявні зони підвищеної швидкості дифузії: границі зерен, дислокації, поверхні.

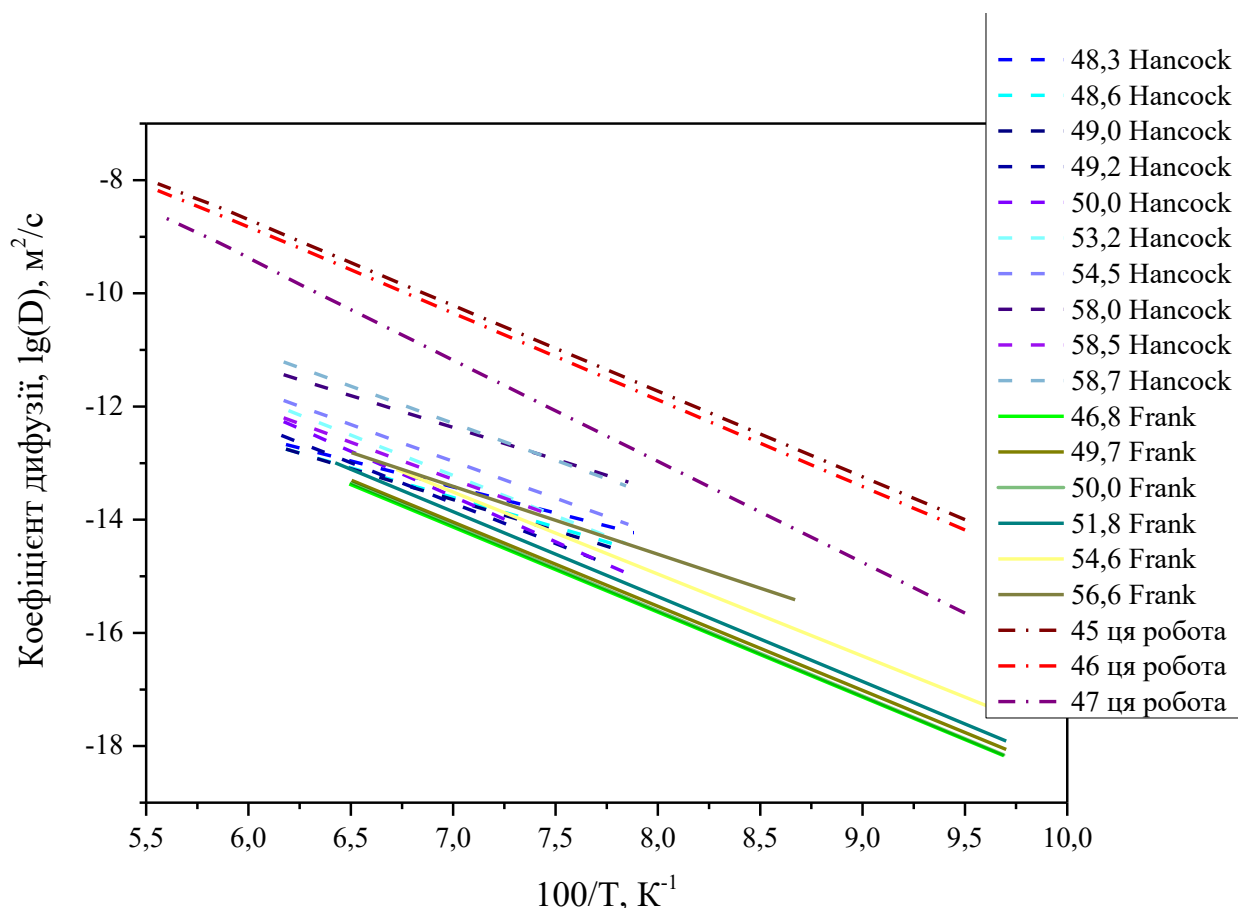


Рисунок 3.10 – Порівняння отриманих температурних залежностей коефіцієнта самої дифузії Ni у фазі $B2\text{-NiAl}$ з літературними даними, цифрами вказані концентрації Ni [6, 34]

Результати моделювання дифузійних процесів у фазі $B2\text{-NiAl}$ з концентрацією Ni 45 ат.% та 46 ат.% є майже однаковими, що може свідчити про те, що при подальшому збільшенні концентрації вакансій в підгратці Ni збільшення коефіцієнту дифузії відбуватися не буде, що частково узгоджується з даними, наведеними в роботі [6]. Хоча Frank і зазначає, що для всіх збіднених на Ni систем коефіцієнти дифузії майже незмінні. Можна зробити висновок, що для встановлення чіткої залежності необхідне проведення додаткових молекулярнодинамічних досліджень за більших та менших концентрацій Ni.

3.3 Енергія активації дифузії Ni в фазі $B2\text{-NiAl}$

Відомо, що залежність коефіцієнта дифузії від температури виражається законом Арреніуса:

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{Q}{kT}\right), \quad (3.1)$$

де D - коефіцієнт дифузії;

D_0 – перед експоненціальний фактор;

Q – енергія активації дифузії;

k – постійна Больцмана;

T – температура.

Прологарифмувавши (3.1) отримаємо:

$$\ln D = \ln D_0 - \frac{Q}{kT} \quad (3.2)$$

В координатах Арреніуса залежність натурального логарифма коефіцієнта дифузії від одиниці поідленної на температуру має вигляд прямої лінії, тобто описується рівнянням:

$$y = a + bx \quad (3.3)$$

Таким чином, порівнюючи (3.2) та (3.3) отримаємо, що:

$$y = \ln D;$$

$$a = \ln D_0;$$

$$b = -Q/k;$$

$$x = 1/T.$$

Відповідно, побудувавши залежності $\ln D - 1/T$ можна розрахувати перед експоненціальний фактор та енергію активації дифузії за рівнянням прямої в координатах Арреніуса.

Для розрахунку енергії активації скористаємося формулою:

$$Q = b x k \quad (3.4)$$

При моделюванні металічних матеріалів в LAMMPS по замовчуванню для енергії використовуються еВ, тобто постійна Больцмана $k = 8,617 \times 10^{-5} \text{ еВ} \cdot \text{К}^{-1}$.

За формулою (3.4) було розраховано енергії активації для досліджуваних систем з 45 ат.% - 47 ат.% Ni, які відповідно склали:

- для 45 ат.% Ni: 2,78 еВ;
- для 46 ат.% Ni: 2,64 еВ;
- для 47 ат.% Ni: 3,23 еВ.

Найбільш ґрунтовне дослідження енергій активації наведено в роботі [6], для досліджуваних систем автори вказують енергію активації $Q = 3,12 \text{ еВ}$. Слід зазначити, що дослідження проводились при значно менших температурах, що не перевищували 1500 К, тоді як зі збільшенням температури енергія активації зменшується. Отримані результати відповідають літературним даним, на підставі чого можна зробити висновки, що результати симуляції не суперечать фізичним основам.

Значно вища енергія активації для системи з концентрацією Ni 47 ат.% пояснює сповільнення дифузії для даної системи, як було зазначено вище.

Висновки до розділу 3

1) Встановлена концентраційна залежність коефіцієнту дифузії Ni у впорядкованій фазі B2-NiAl за вакансійним механізмом в температурному інтервалі 1600 К - 1800 К: спостерігається суттєве прискорення дифузійних процесів зі зниженням вмісту Ni у фазі B2-NiAl до 45 ат.% - 46 ат.%.

2) Виражена концентраційна залежність коефіцієнту дифузії Ni у впорядкованій фазі B2-NiAl обумовлена тим, що в даному випадку основним механізмом дифузії є механізм «потрійного дефекту». Збільшення кількості вакансій в підгратці Ni впорядкованої фази B2-NiAl не призводить до прискорення дифузії внаслідок сповільнення утворення антиструктурних атомів Ni у підгратці Al.

3) Молекулярнодинамічне дослідження дозволяє аналізувати дифузійні процеси у впорядкованій фазі B2-NiAl за температури, вищих 1500 К: за нижчих температур середньоквадратичне відхилення атомів в процесі моделювання є недостатнім для розрахунку відповідних коефіцієнтів дифузії.

4 ОРГАНІЗАЦІЙНО-ЕКОНОМІЧНА ЧАСТИНА

4.1 Наукова-технічна актуальність НДР

Підвищення вимог до паливної ефективності, екологічних та шумових норм для пасажирської авіації спонукає конструкторів до створення більш ефективних реактивних двигунів. Основним напрямком для підвищення ефективності реактивного двигуна є збільшення температури робочого тіла – газу. Використовувані зараз суперсплави Ni працюють на межі можливостей, підвищення температури газу без заміни матеріалу лопаток та термічно навантажених частин неможливо. На паливну ефективність впливає не тільки температура газу в реактивному двигуні, а й загальна його вага.

Найкраще на роль наступників нікелевих суперсплавів підходять алюмініди нікелю – NiAl та Ni₃Al. Вони поєднують високу температуру плавлення та порівняно низьку вагу. Добре досліджений та вже широко використовуваний Ni₃Al, у порівнянні з NiAl має більшу щільність – 7,29 г/см³ проти 5,87 г/см³ та нижчу температуру плавлення – 1385 °C проти 1638 °C. До переваг NiAl також відносять високу корозійну стійкість у агресивних середовищах та зміцнення при нагріванні. Така сукупність характеристик, звісно, привертає увагу науковців та промисловості. До недоліків слід віднести крихкість за невисоких температур, проте цей ефект зменшується при легуванні.

Попередні дослідження показують, що використанні NiAl замість нікелевих суперсплавів дозволяє скоротити вагу лопаток турбін на 40%, що в умовах авіабудування дозволяє не тільки підвищити паливну ефективність за рахунок зменшення маси складових частин, підвищення температури газу, а також, як результат, збільшити дальність польоту літака при використанні тієї ж кількості пального.

Для введення у користування нових матеріалів необхідно розробити режими обробки, механізми легування для досягнення максимальних характеристик. Проведення великих серій експериментів з пошуку оптимального складу

стандартними методами є дуже затратним, тому використовується комп'ютерне моделювання. Такий підхід дозволяє попередньо встановити близький до оптимального склад та властивості матеріалу, щоб в подальшому провести натурні експерименти.

4.2 Мета і завдання НДР

Метою даної роботи було виявити вплив концентрації компонентів на розвиток процесів самодифузії за вакансійним механізмом в сплавах системи Ni-Al.

Завданням даної роботи було:

1. Обробка доступних літературних даних щодо досліджень у даній області;
2. Розробка методики молекулярнодинамічного дослідження;
3. Розробка коду для програмного комплексу LAMMPS;
4. Підбір оптимальних параметрів моделювання;
5. Проведення 3 серій обчислювальних експериментів;
6. Обробка результатів;
7. Встановлення залежності коефіцієнта самодифузії від концентрації компонентів;
8. Формування висновків по роботі та напрямків подальших досліджень.

4.3 Розрахунок витрат на проведення НДР

Дослідження проводилось на базі кафедри Фізики металів Національного Технічного Університету України «Київський політехнічний інститут ім. Ігоря Сікорського». Плановий кошторис на виконання НДР включає такі статті витрат:

- заробітна плата науково-виробничому персоналу;
- ЄСВ;
- витрати на електроенергію;

- інші прями невраховані витрати;
- накладні витрати.

4.3.1 Витрати на оплату праці

Заробітна плата науково-виробничому персоналу розраховується в залежності від об'єму виконуваних робіт, навантаження та денної заробітної плати, з урахуванням кваліфікації, завантаженості та кількості задіяних на кожному етапі одиниць персоналу.

Для виконання даної НДР залучалися 2 одиниці науково-виробничого персоналу: доцент та старший викладач кафедри фізики металів. В Національному Технічному Університеті України «Київський політехнічний інститут ім. Ігоря Сікорського» місячні ставки заробітної плати для відповідних одиниць науково-виробничого персоналу складають:

Доцента – 14378 грн.;

Науковий співробітник – 8466 грн.;

Старшого викладача – 12612 грн.

Для розрахунку денної заробітної плати кожного задіяного співробітника необхідно поділити місячну заробітну плату на кількість днів у місяці, для п'ятиденного робочого тижня, середня кількість робочих днів складає 21,2. Провівши необхідні розрахунки, отримуємо, що денна заробітна плата кожного з виконавців дорівнює:

Доцента – 678,2 грн.;

Наукового співробітника – 399,33 ргн.;

Старшого викладача – 594,9 грн.;

За умови відсутності методик розрахунку трудомісткості етапів НДР, трудомісткість визначається на основі наданих експертних оцінок провідних фахівців. За такою схемою оцінювання трудомісткості проводиться для макроетапів НДР, не розбиваючи на окремі операції. В результаті експертної оцінки були встановлені показники трудомісткості, що наведені в табл. 4.1.

Таблиця 4.1 – Трудомісткість проведення НДР

Макроетапи НДР	Трудомісткість, людино-дні		
	Доцент	Старший викладач	Науковий співробітник
1. Аналіз фахових публікацій з теми	–	–	15
2. Обґрунтування теми та напрямів дослідження	2	2	–
3. Розробка методики проведення досліджень за темою	2	4	–
4. Проведення експериментів	–	–	30
5. Обговорення результатів НДР	15	4	–
Загалом	19	10	45

Розмір фонду заробітної плати (ФЗП), необхідного для виконання НДР розраховується як добуток трудомісткості на денну заробітну плату кожного задіяного співробітника. Таким чином, фонд заробітної плати для даної НДР складатиме: $ФЗП = 19 \times 678,2 + 10 \times 594,9 + 45 \times 399,33 = 36804,65$ грн.

4.3.2 Розмір єдиного соціального внеску

Єдиним соціальним внеском називається обов'язкове відрахування на страхування. За законом України, ставка ЄСВ складає 22% і нараховується на основі загальних витрат на оплату праці по темі НДР. Таким чином, величина

ЄСВ для даної НДР складатиме: $ЄСВ = ФЗП \times 0,22 = 36804,65 \times 0,22 = 8097,02$ грн.

4.3.3 Матеріали, необхідні для проведення досліджень

Для даної НДР не використовувались матеріали, відповідно відсутні відходи.

4.3.4 Витрати на електроенергію

Так як розрахунки проводились за допомогою комп'ютерного моделювання, розрахуємо витрати електроенергії.

Для проведення одного експерименту необхідно 3 дні комп'ютерного часу, тобто 72 години. Комп'ютер при цьому працює на піковій потужності, повністю завантажуючи центральний процесор, вважатимемо, що він споживає максимально можливу потужність, встановлену блоком живлення – 350 Вт. Загальна кількість експериментів склала 58, тобто було затрачено: $t = 58 \times 72 = 4176$ год.

Тоді, загальна кількість витраченої електроенергії складає: $P = 4176 \times 350 = 1461000$ Вт·год = 1,461 МВт·год.

Для юридичних осіб вартість 1 МВт·год складає 69,6 грн., без НДС, враховуючи НДС і вартість 1 МВт·год, загальні витрати на електроенергію складатимуть: $V_E = 69,6 \times 1,461 + 69,6 \times 1,461 \times 0,2 = 122,01$ грн.

4.3.5 Витрати на спеціальне обладнання

Спеціальне обладнання для проведення НДР не закуповувалось, усе обладнання було надано кафедрою фізики металів Національного Технічного Університету України «Київський політехнічний інститут ім. Ігоря Сікорського».

4.3.6 Вартість послуг сторонніх організацій

Для виконання НДР сторонні організації не залучалися.

4.3.7 Витрати на службові відрядження

Службові відрядження не планувались. Усі необхідні експерименти поставлені на кафедрі фізики металів.

4.3.8 Інші непрямі невраховані витрати

У цій статті витрат враховуються усі витрати, що не увійшли до попередніх розрахунків. При проведенні НДР непрямі витрати зазвичай приймаються на рівні 10% від суми врахованих витрат на НДР:

$$I_B = (\PhiЗП + \text{ССВ} + B_E) \times 0,1 \quad (4.1)$$

Тоді, за формулою (4.1): $I_B = (36804,65 + 8097,02 + 122,01) \times 0,1 = 4502,37$ грн.

4.3.9 Накладні витрати

Накладні витрати приймаються на рівні 20% від усіх прямих витрат і включають: витрати на амортизацію, управління, забезпечення належних норм з охорони праці та безпеки, оплати супутніх комісій та податків, витрати на доступ до науково-технічної документації, тощо. В даному випадку накладні витрати складатимуть:

$$H_B = (\PhiЗП + \text{ССВ} + B_E + I_B) \times 0,2 \quad (4.2)$$

Тоді $H_B = (36804,65 + 8097,02 + 122,01 + 4502,37) \times 0,2 = 9905,21$ грн.

4.3.10 Розрахунок планової кошторисної вартості теми

Загальний кошторис по темі НДР наведено в табл. 4.2.

Таблиця 4.2 – Планова калькуляція кошторисної вартості НДР

Найменування статей витрат	Сума, грн	Обґрунтування
1. Витрати на оплату праці	36804,65	Відповідно до розрахунків
2. Єдиний соціальний внесок	8097,02	22,0 % від загальних витрат на оплату праці
3. Матеріали для проведення досліджень	–	Для дослідження не використовувались матеріали
4. Енергоносії для проведення досліджень	122,01	Відповідно до розрахунків
5. Спецобладнання для наукових цілей	–	Не використовувалось
1. Вартість послуг сторонніх організацій	–	Сторонні організації не залучались
7. Витрати на службові відрядження	–	Службові відрядження по темі відсутні
8. Інші невраховані прямі витрати по темі	4502,37	10 % від суми прямих розрахованих витрат по темі
9. Накладні витрати	9905,21	20 % від суми прямих витрат
10. Усього витрат по темі	59431,26	Сума попередніх статей

Як видно з таблиці 4.2, загальна кошторисна вартість розробки теми НДР складає: 59431,26 грн.

4.4 Науково-технічна ефективність НДР

НДР по даній темі мають теоретичний характер, встановлення шуканих залежностей цікаве перш за все науковій спільноті. Внаслідок теоретичної

направленості роботи, річний економічний ефект розрахувати неможливо, також неможливо розрахувати єдиночасні або поточні витрати, так як немає вихідних даних для таких розрахунків. Для даної НДР доцільно використовувати бальну систему оцінювання економічної ефективності за такими показниками:

- важливість розробки (K_1);
- можливість використання результатів розробки (K_2);
- теоретичне значення та рівень новизни (K_3);
- складність дослідження (K_4).

Коефіцієнт, що визначає важливість розробки (K_1) має таку бальну шкалу:

- ініціативна робота, яка не входить до складу комплексної програми та не є завданням директивних органів – 1 бал;
- робота виконується за угодою про науково-технічне співробітництво – 3 бали;
- робота являє собою частину відомчої програми – 5 балів;
- робота являє собою частину комплексної міжвідомчої програми з елементами впровадження результатів – 7 балів;
- робота є частиною міжнародної комплексної програми – 8 балів.

Коефіцієнт K_2 , що характеризує можливість використання результатів розробки може приймати такі значення:

- результати розробки можна використати тільки в даному підрозділі – 1 бал;
- результати розробки можуть бути використані тільки однією організацією – 3 бали;
- результати розробки можуть бути використані декількома організаціями – 5 балів.
- результатами розробки можуть користуватися в масштабах однієї галузі – 8 балів;
- результатами розробки можуть користуватися у різних галузях – 10 балів.

Коефіцієнтом K_3 визначається теоретичне значення та рівень новизни НДР за такою шкалою:

- робота являє собою аналіз, узагальнення або класифікацію відомої інформації, подібні результати раніше були відомі в досліджуваній галузі – 2 бали;
- під час виконання роботи отримана нова інформація, яка доповнює уявлення про сутність досліджуваних процесів – 3 бали;
- внаслідок виконання роботи отримана нова інформація, яка частково змінює уявлення про природу досліджуваних процесів – 5 балів;
- внаслідок виконання НДР створені нові теорії, методики тощо – 6 балів;
- отримана інформація формує принципово нові уявлення, які не були відомі раніше – 8 балів.

Складність дослідження (коефіцієнт K_4) оцінюється за поданою бальною шкалою:

- роботу виконує один підрозділ, витрати до 10 000 гривень – 1 бал;
- роботу виконує один підрозділ, витрати від 10 000 до 50 000 гривень – 3 бали;
- роботу виконує один підрозділ, витрати від 50 000 до 100 000 гривень – 5 балів;
- робота виконується декількома підрозділами, витрати від 100 000 до 200 000 гривень – 7 балів;
- робота виконується декількома організаціями, витрати понад 200 000 гривень – 9 балів.

В табл. 4.3 подана бальна оцінка ефективності НДР.

Загальна бальна оцінка B розраховується як добуток усіх коефіцієнтів:

$$B = K_1 \times K_2 \times K_3 \times K_4 \quad (4.3)$$

Таблиця 4.3 – Бальна оцінка ефективності НДР

Показники оцінки ефективності НДР	Умовне позначення показника	Характеристика даної розробки	Кількість балів
1. Важливість розробки	K_1	робота виконується за угодою про науково-технічне співробітництво	3
2. Можливість використання результатів розробки	K_2	результатами розробки можуть користуватися споживачі в різних галузях	10
3. Теоретична значимість та рівень новизни розробки	K_3	внаслідок виконання роботи отримана нова інформація, яка частково змінює уявлення про природу досліджуваних процесів	5
4. Складність проведення дослідження	K_4	роботу виконує один підрозділ, витрати від 50 000 до 100 000 гривень	5

Згідно таблиці 4.3, загальна бальна оцінка ефективності НДР за заданою темою становитиме: $B = 3 \times 10 \times 5 \times 5 = 750$.

Для розрахунку умовного ефекту НДР скористуємося формулою:

$$E_{\text{НДР}}^y = 500 \cdot B - E_n \cdot V_{\text{НДР}}, \quad (4.4)$$

де 500 – умовна вартість одного балу;

E_n – нормативний коефіцієнт економічної ефективності, який для подібних НДР складає 0,1 – 0,3;

$V_{\text{НДР}}$ – сумарні витрати на виконання НДР (загальні витрати на розробку теми, наведені в табл. 4.2).

Приймаючи $E_n=0,2$, $B_{НДР} = 59431,26$ грн., розрахуємо умовний економічний ефект за формулою (4.4): $E_{НДР}^y = 500 \cdot 750 - 0,2 \cdot 59431,26 = 363113,75$ грн.

Економічною ефективністю НДР називається відношення умовного ефекту виконання НДР до сумарних витрат на виконання НДР та визначається коефіцієнтом E_e :

$$E_e = \frac{E_{НДР}}{B_{НДР}} \quad (4.5)$$

Для даної НДР коефіцієнт економічної ефективності складатиме:

$$E_e = \frac{363113,75}{59431,26} = 6,1.$$

Доцільність виконання роботи визначається саме за коефіцієнтом економічної ефективності: якщо він перевищує 1, то НДР є доцільною. В нашому випадку E_e значно перевищує одиницю, що свідчить про доцільність виконання НДР.

Висновки до розділу 4

1. Кошторисна вартість проведення НДР за темою «Концентраційна залежність параметрів дифузії Ni у впорядкованій фазі B2-NiAl» складає 59431,26 грн.

2. Розрахований коефіцієнт економічної ефективності E_e складає 6,1, що свідчить про доцільність проведення НДР за заданою темою.

5 ОХОРОНА ПРАЦІ

Завданням даного розділу є аналіз шкідливих та небезпечних факторів, за яких може виникати небезпека для дослідника, а також забезпечення належних умов праці при дослідженні концентраційної залежності параметрів дифузії Ni у впорядкованій фазі B2-NiAl методами молекулярної динаміки, а також розробка системи заходів, спрямованих на знешкодження таких факторів і небезпек для дослідника у разі виникнення надзвичайних ситуацій.

Для НДР, що виконуються з використанням персонального комп'ютера, слід розглянути такі фактори:

- мікроклімат;
- якість повітря у зоні робіт;
- освітлення;
- вплив низько- та високочастотного шуму;
- вплив електричного струму;
- вплив електромагнітного випромінювання комп'ютера.

5.1 Аналіз параметрів роботи в приміщенні

НДР проводилась на базі кафедри фізики металів Інженерно-фізичного факультету Національного Технічного Університету України «Київський політехнічний інститут ім. Ігоря Сікорського» в корпусі №9, 5 поверх, аудиторія №509. Схема аудиторії наведена на рис. 5.1

В аудиторії знаходяться такі об'єкти:

- 1 – комп'ютерний стіл;
- 2 – персональний комп'ютер;
- 3 – двері;
- 4 – вікно.

Основні параметри приміщення аудиторії наведені в табл. 5.1.

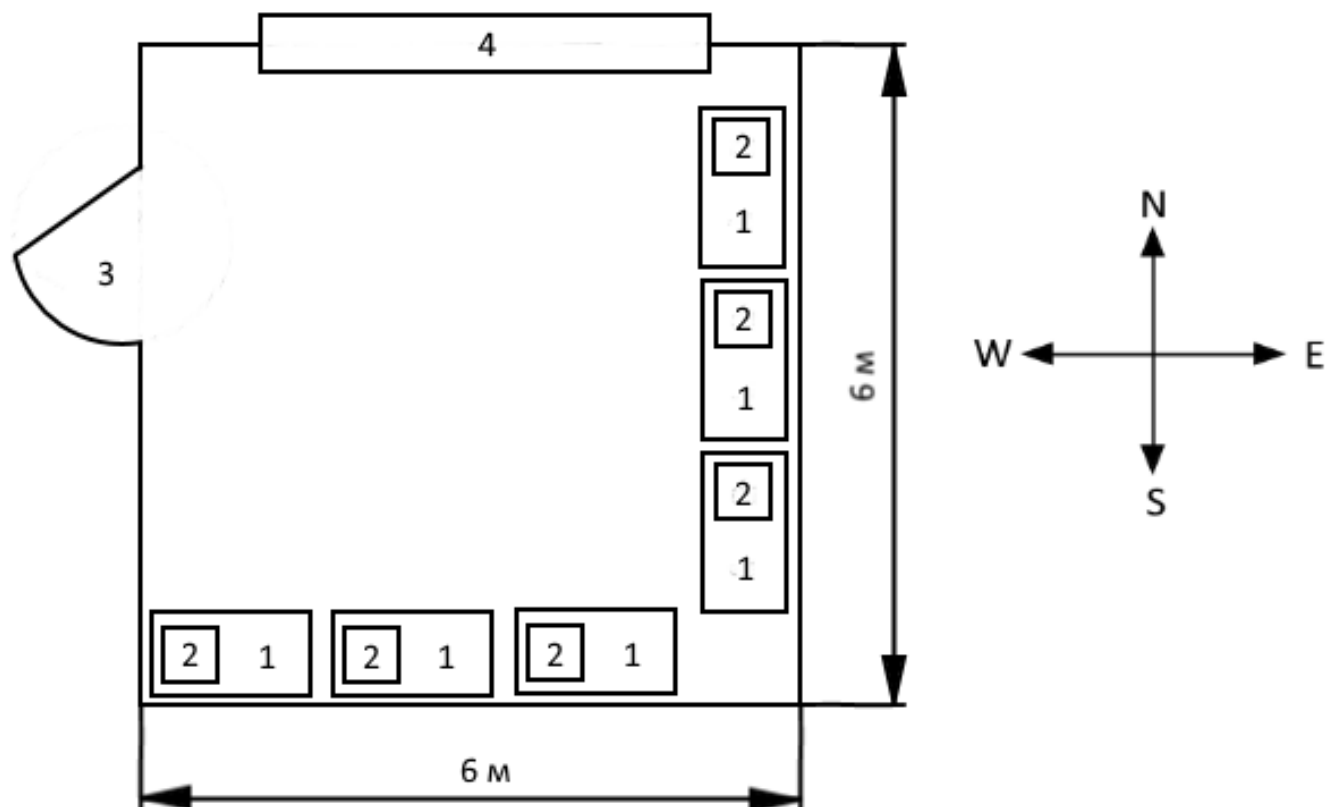


Рисунок 5.1 – Схема аудиторії, в якій проводилась НДР

Таблиця 5.1 – Розміри аудиторії, в якій проводилась НДР

Параметр	Розміри, м
Параметри лабораторії	
Довжина	6
Ширина	6
Висота	4
Параметри вікна	
Ширина	4
Висота	2,5

Таким чином, площа приміщення складає: $S = 6 \times 6 = 36 \text{ м}^2$.

Тоді об'єм приміщення аудиторії складає: $V = 6 \times 6 \times 4 = 144 \text{ м}^3$.

Одночасно в лабораторії працювало 2 людини, таким чином, площа на 1 працюючого складає 18 м^2 , а об'єм на одного працюючого – 72 м^3 , порівняння відповідних параметрів з нормами згідно ДБН В.2.2-28-2010 [53] наведено в табл. 5.2.

Таблиця 5.2 – Реальні та нормативні параметри приміщення

Параметр приміщення	Реальне значення	Нормативне значення
Площа на 1 працюючого	18 м^2	6 м^2
Об'єм на 1 працюючого	72 м^3	20 м^3

Як видно з табл. 5.2 площа на 1 працюючого і об'єм на 1 працюючого повністю відповідають санітарним нормам.

Відповідно до [54], важкість робіт має категорію – Іб. Ця категорія включає в себе легкі фізичні роботи з витратами енергії до 150 Ккал/год . Порівняння відповідних нормативних та вимірних параметрів мікроклімату наведені в табл. 5.3.

Таблиця 5.3 – Параметри мікроклімату в робочій зоні аудиторії № 509

Період року	Температура повітря, °С		Відносна вологість, %		Швидкість руху повітря, м/с	
	Фактична	Допустима	Фактична	Допустима	Фактична	Допустима
Теплий	25	19...30	50	<60	0,2	0,1...0,3
Холодний	18	17...25	65	<75	0,1	<0,2

Приміщення аудиторії №509 має водяне опалення та природну вентиляцію.

Відповідно до табл. 5.3 параметри мікроклімату в приміщенні аудиторії №509 відповідають санітарним вимогам.

5.2 Аналіз складу повітря приміщення

Якість та чистота повітря у виробничих приміщеннях визначається кількістю шкідливих речовин та пилу у складі повітря. Вміст шкідливих речовин в повітрі приміщення, де проводиться НДР не має перевищувати гранично допустимих значень, що встановлені [55]. Шкідливі речовини можуть потрапляти у повітря робочої зони під час технологічних операцій плавки, шліфування та ін. їх кількість та характер напряду залежать від використовуваної сировини.

В приміщенні аудиторії №509 не проводиться ніяких операції по обробці твердих або рідких матеріалів. Щоденно в приміщенні проводиться вологе прибирання, провітрювання. Виходячи з цього, можна зробити висновки, що шкідливі речовини та вміст пилу в робочій зоні не перевищують встановлених санітарних норм.

5.3 Виявлення та аналіз шуму, вібрацій, ультра- та інфразвуку

Шуми та вібрації можуть створюватись під час роботи таких компонентів комп'ютера: блок живлення, його вентилятори охолодження, вентилятори центрального процесору та графічного прискорювача, жорсткий диск. Також шум та вібрація можуть виникати при роботі принтерів, сканерів, факсів. Додаткові джерела шуму можуть розташовуватись поза робочою зоною.

Нормування шумового та вібраційного навантаження здійснюється відповідно до [56]. Згідно [56] встановлюються також методи та засоби боротьби з шумом: застосування засобів звукопоглинання, що обґрунтовується спеціальними інженерно-акустичними розрахунками. Для боротьби з шумами та вібраціями використовують спеціальні гумові чи поролонові покриття, або інші шумо- та вібропоглиначі матеріали, сертифіковані органами санітарно-епідеміологічного нагляду.

За умови невисокого навантаження на персональний комп'ютер може спостерігатися забруднення в інфразвуковому діапазоні, внаслідок невисокої (порядку 20 Гц) швидкості обертання вентиляторів охолодження.

Виникнення ультразвукових коливань під час роботи персонального комп'ютера малоімовірно, так як максимальні частоти обертання рухомих деталей персонального комп'ютера не перевищують 7 кГц. Проте при роботі аналого-цифрових перетворювачів, принтерів чи сканерів такі коливання можуть виникати.

Для захисту від ультразвукових шумів використовують спеціалізовані негорючі перфоровані плити, панелі, мінеральну вату або аналогічні матеріали, підвісні стелі з подібними поглинаючими властивостями.

5.4 Електробезпека

Для виконання даної НДР використовувались лише персональні комп'ютери. Живлення персонального комп'ютера відбувається від мережі змінного струму напругою 220 В та частотою 50 Гц. В аудиторії №509 струменепровідна підлога, підтримуються низка вологість, відповідно до [57] такі приміщення відносяться до таких, не відсутній підвищений рівень небезпеки враження електричним струмом.

Для безпечного користування персональним комп'ютером усі штепселі та кабелі мають бути справними, без пошкоджень, виготовлені та сертифіковані за прийнятими в Україні стандартами. Конструкція штепсельних з'єднань окрім фази та нуля має включати також спеціальний нульовий захисний контакт (заземлення). Для забезпечення максимальної безпеки, спочатку має відбуватися підключення заземлення, а потім струмопровідних контактів, роз'єднання відбувається у зворотному порядку. Конструкція штепсельних з'єднань має унеможливити замикання фази та нуля для запобігання виникненню короткого замикання.

Основними причинами ураження електричним струмом є:

- пошкодження ізоляції кабелів живлення системного блоку чи монітору, внаслідок чого відбувається контакт з оголеними частинами кабелів під напругою;
- використання несерійних, саморобних кабелів чи подовжувачів;
- використання не сертифікованих або занадто потужних для наявної мережі обігрівачів в холодну пору року;
- наявність напруги на відключених ділянках внаслідок помилкового запуску обладнання;
- використання таких розеток, штепселів, що вийшли з ладу і мають бути замінені;
- використання обладнання при умовах або навантаженнях, що не передбачені виробником;
- використання незаземленого обладнання;
- недотримання правил електробезпеки при користуванні електрообладнанням.

При проходженні електричного струму організмом людини він викликає такі наслідки, як:

- термічні опіки від нагріву тканин при проходженні струму, так як шкіра людини має величезні значення опору – (3...100) кОм;
- електролітичний розклад внутрішніх рідин людини, в тому числі і крові, на йони;
- порушення біомеханічних процесів: скорочення м'язів, подразнення тканин.

На тяжкість ураження електричним струмом впливають: стан шкіри (пошкодження епітелію, вологість, потовиділення, забруднення), що знижують опір шкіри проходженню електричного струму, а також параметри струму – його частота, напруга та величина струму [58].

Персональні комп'ютери, розміщені в приміщенні аудиторії №509 мають правильно виконане захисне заземлення, справні штепселі. Розетки, кабелі та штепселі обладнання підтримуються у робочому стані та замінюються при виході з ладу персоналом кафедри Фізики металів. Робочі місця в аудиторії розташовані таким чином, щоб унеможливити одночасне торкання корпусів ПК та інших приладів.

5.5 Освітлення

Розрізняють 2 види освітлення: штучне (електричні, або хімічні джерела світла), природне (сонячні промені) та комбіноване. Природне освітлення, відповідно, поділяється на бічне, верхнє та комбіноване, а штучне – на загальне та місцеве.

Правильно підібране освітлення забезпечує найменше зорове навантаження, найвищу якість виконуваних робіт та найбільшу безпеку. Неправильно підібране освітлення може призводити до втоми та зниження чіткості зору, що, в свою чергу, призводить до зниження якості робіт. Недостатня освітленість виробничих територій та приміщень може призводити до травмування персоналу, наїздам рухомої техніки, тощо [59].

Освітлення, як природне так і штучне, регламентується нормами ДБН В.2.5-28:2018 [60] в залежності від характеристики зорової роботи, її розряду, контрастності фону, розміру найменшого об'єкту розрізнення та системи освітлення.

Розглянута НДР виконувалась в аудиторії №509 9 корпусу, її можна охарактеризувати, як роботу середньої точності, що відноситься до четвертого розряду зорових робіт. Єдиним джерелом природного освітлення є вікно з розмірами, що вказані в табл. 5.1. Вікно розташоване з північного боку, має площу 10 м^2 , відстань від робочого місця до вікна складає $0,5 \text{ м} - 5 \text{ м}$.

Штучне загальне освітлення робочої зони представлено стельовими світильниками з люмінесцентними лампами ЛБ-40 (30 одиниць в кімнаті). Для

місцевого освітлення використовуються світлодіодні лампи. Освітленість робочого місця, у відповідності до ДБН В.2.5.28-2018 [60] складає 200 лк.

5.6 Пожежна безпека

Пожежна безпека об'єкта – такий стан об'єкта, при якому мінімізується імовірність виникнення і розвитку пожежі, виключається вплив на людей її шкідливих факторів, забезпечується збереження матеріальних цінностей, що знаходяться на об'єкті.

Пожежі відносять до ситуацій техногенного характеру (надзвичайні ситуації 1 класу). Для визначення категорії приміщення використовують норми, затверджені в НАПБ Б.03.002-2007 [62], відповідно до них приміщення аудиторії №509 відноситься до категорії В (в приміщенні є горючі та важко горючі рідини, також тверді горючі та важко горючі речовини, приміщення в якому вони знаходяться не відносяться до категорії А або Б). Займання може статися в місцях розміщення комп'ютерів, місцях розташування електропроводки через коротке замикання, перегрів компонентів комп'ютерів під час виконання розрахунків по НДР.

Приміщення забезпечене водою із загальної мережі водопостачання, вогнегасниками ОУБ-2 (вуглекислотноброметиловий), в коридорах та сходах знаходяться шухляди з піском, вогнегасники ОХП-10, ОП-1Б. Гасіння пожеж електроустаткування за допомогою води або пінних вогнегасників заборонено, тому гасіння необхідно проводити за допомогою вуглекислотних або вуглекислотноброметиллових вогнегасників, які наявні в аудиторії. Використання ОУБ-2 задовольняють обмеженням на використання цих вогнегасників за напруги до 1000 В. Аудиторія додатково оснащена автоматичними датчиками-сигналізаторами ДТП, які реагують на температуру. На випадок пожежі в аудиторії є план евакуації персоналу, зображений на рис. 5.2. Сповіщення персоналу про пожежу відбувається за допомогою службового зв'язку.

Для забезпечення пожежної безпеки регулярно проводяться такі заходи:

- перевірка засобів пожежогасіння;
- перевірка системи пожежної сигналізації;
- випробування опору ізоляції підвищеною напругою 500 В;
- перевірка справності розеток, електропроводки;
- недопущення паління у непризначених для цього місцях.



Рисунок 5.2 – План евакуації

5.7 Вимоги безпеки при виникненні аварійних ситуацій

У випадку виявлення пробою ізоляції корпусу комп'ютера необхідно вимкнути живлення в аудиторії та повідомити відповідального за аудиторію.

У випадку потрапляння людини під дію електричного струму необхідно вимкнути живлення в аудиторії, покласти потерпілого на дерев'яний паркет аудиторії, підклавши під голову одяг та викликати швидку за телефоном 103, за необхідності провести первинні реанімаційні заходи.

У випадку загоряння комп'ютера або проводки необхідно вимкнути живлення в аудиторії, викликати пожежну бригаду за телефоном 101 та приступити до гасіння пожежі наявним вогнегасником типу ОУБ-2.

Висновки до розділу 5

1. Проведено аналіз приміщення, якості повітря, можливих шумових та інших забруднень.
2. Розглянуто надзвичайні ситуації, що можуть виникнути при виконанні НДР та шляхи їх усунення, алгоритм дій при виявленні аварій.

ВИСНОВКИ

1) Сплави на основі NiAl є перспективними для використання у якості високотемпературних матеріалів завдяки високим температурам плавлення, низькій щільності та ефекту зміцнення при нагріванні. Найбільш перспективною є високовпорядкована фаза B2-NiAl завдяки найнижчій щільності та найвищій температурі плавлення.

2) Встановлена концентраційна залежність коефіцієнту дифузії Ni у впорядкованій фазі B2-NiAl за вакансійним механізмом в температурному інтервалі 1600 K - 1800 K: спостерігається суттєве прискорення дифузійних процесів зі зниженням вмісту Ni у фазі B2-NiAl до 45 ат.% - 46 ат.%.

3) Виражена концентраційна залежність коефіцієнту дифузії Ni у впорядкованій фазі B2-NiAl обумовлена тим, що в даному випадку основним механізмом дифузії є механізм за типом «потрійного дефекту». Збільшення кількості вакансій в підгратці Ni впорядкованої фази B2-NiAl не призводить до прискорення дифузії внаслідок сповільнення утворення антиструктурних атомів Ni у підгратці Al.

4) Молекулярнодинамічне дослідження дозволяє аналізувати дифузійні процеси у впорядкованій фазі B2-NiAl за температури, вищих 1500 K: за нижчих температур середньоквадратичне відхилення атомів в процесі моделювання є недостатнім для розрахунку відповідних коефіцієнтів дифузії.

5) Загальна кошторисна вартість НДР складає 59431,26 грн., а коефіцієнт економічної ефективності НДР – 6,1.

6) При виконанні НДР виконувались усі вимоги щодо забезпечення безпеки та нормальних умов роботи виконавців, що передбачені законодавством України.

CONCLUSIONS

1) NiAl-based alloys are promising for use as high-temperature materials due to high melting points, low density and the hardening effect. The most promising is the highly ordered *B2*-NiAl phase due to the lowest density and the highest melting point.

2) The concentration dependence of the Ni diffusion coefficient in the ordered *B2*-NiAl phase by the vacancy mechanism in the temperature range 1600 K - 1800 K were established: there is a significant acceleration of diffusion processes with a decrease in Ni content in the *B2*-NiAl phase to 45 at.% - 46 at.% .

3) Concentration dependence of the Ni diffusion coefficient in the ordered *B2*-NiAl phase is due to the main diffusion mechanism - "triple defect". The increase in the number of vacancies in the Ni sublattice of the ordered *B2*-NiAl phase does not lead to accelerated diffusion due to the slowing down of the formation of antistructural Ni atoms in the Al sublattice.

4) Molecular dynamics study allows to analyze diffusion processes in the ordered *B2*-NiAl phase at temperatures above 1500 K: at lower temperatures, the standard deviation of atoms in the modeling process is insufficient to calculate the corresponding diffusion coefficients.

5) The total estimated cost of R&D work is 59431.26 hrivnas, and the coefficient of economic efficiency of R&D work is 6.1.

6) During the R&D work, all the requirements for ensuring the safety and normal working conditions of the performers, provided by the legislation of Ukraine, were met.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Каблов Е. Н. Интерметаллиды титана и никеля для изделий новой техники / Е. Н. Каблов, В. И. Лукин // Сварка и родственные технологии. – 2008. – №11. – С. 76-82.
2. Конструкционные жаропрочные (б+у)-сплавы на основе NiAl с повышенной низкотемпературной пластичностью / К. Б. Поварова, Н. К. Казанская, Б. С. Ломберг, Ю. А. Бондаренко, Д. Ю. Школьников // Металлург. – 1996. – №5.
3. Аубакирова Р. К. Изучение материалов на основе интерметаллидов Al-Ni, полученных методом порошковой металлургии / Р. К. Аубакирова, А. В. Паничкин, И. Кисамеденова // Scientific Proceedings I: зб. матеріалів міжнародної конференції International Scientific Conference "Industry 4.0". – 2016. – Т. 1. – С. 120-123.
4. Чаплыгин П. А. Структурно-фазовые характеристики интерметаллида NiAl вблизи эквипомного состава: автореф. дис. на здобуття наук. ступеня канд. техн. наук : спец. 01.04.07 "Физика конденсированного состояния" / Чаплыгин Павел Александрович – Барнаул, 2019. – 23 с.
5. Косицын С. В. Фазовые и структурные превращения в сплавах на основе моноалюминида никеля / С. В. Косицын, И. И. Косицына // Успехи физики металлов. – 2008. – Т. 9. – №2. – С. 195-258.
6. Ni tracer diffusion in the B2-compound NiAl: influence of temperature and composition / S.Frank, S. V. Divinski, U. Sodervall, C. Herzig. // Acta materialia. – 2001. – Vol. 49. – №8. – P. 1399–1411.
7. Predel B. Al-Ni (Aluminum-Nickel) / B. Predel // Ac-Au – Au-Zr. – Berlin: Berlin Heidelberg, 2006. – (Springer-Verlag). – (Landolt-Börnstein - Group IV Physical Chemistry; vol. 5). – P. 54-65.
8. Okamoto H. Al-Ni (aluminum-nickel)/ H. Okamoto // Journal of phase equilibria. – 1993. – Vol. 14. – №. 2. – P. 257-259.

9. Литейные сплавы на основе Ni3Al и способ их выплавки / О. А. Базылева, К. Б. Поварова, Н. К. Казанская, А. А. Дроздов. // Заготовительные производства в машиностроении. – 2010. – №1. – С. 20.
10. Каблов Е. Н. Никелевые жаропрочные сплавы для литья лопаток с направленной и монокристаллической структурой / Е. Н. Каблов, И. Л. Светлов, Н. В. Петрушин. // Машиностроение. – 1997. – №4. – С. 18.
11. Nash P. Phase diagrams of binary nickel alloys / P. Nash, M. F. Sigleton, J. M. Murray // (Materials Park). – (Monograph series on alloy phase diagrams; vol. 6). – 1991. – 394 p.
12. Yamamoto A. Al9Ni2 precipitates formed in an Al-Ni dilute alloy/ A. Yamamoto, H. Tsubakino // Scripta materialia. – 1997. – Vol. 37. – №. 11. – P. 1721-1725.
13. Коломыцев П. Т. Жаростойкие диффузионные покрытия / П. Т. Коломыцев. – Москва: Металлургия, 1979. – 272 с.
14. Тамарин Ю. А. Жаростойкие диффузионные покрытия лопаток ГТД / Ю. А. Тамарин. – Москва: Машиностроение, 1978. – 136 с.
15. Самсонов Г. В. Тугоплавкие соединения / Г. В. Самсонов, Н. М. Винницкий. – Москва: Металлургия, 1976. – 560 с.
16. Darolia R. NiAl alloys for high-temperature structural applications / R. Darolia // The Journal of the Minerals. – 1991. – Vol. 43. – №. 3. – P. 44-49.
17. Singleton R. H. Nickel Aluminide Leading Edge for a Turbine Vane. / R. H. Singleton, A. V. Wallace, D. G. Miller // Summary of the Eleventh Refractory Composites Working Group Meeting. – AFML-179. – 1966. – Vol. 717. – P. 717-738.
18. Lindblad N. R. A review of the behavior of aluminide-coated superalloys / N. R. Lindblad // Oxidation of Metals. – 1969. – Vol. 1. – №. 1. – P. 143-170.
19. Darolia R. NiAl Alloys for High Temperature Structural Applications / R. Darolia. // JOM. – 1991. – Vol. 43. – №3. – P. 44-49.
20. Mechanical properties of high purity single crystal NiAl / [R. Darolia, W. Walston, R. Noebe and others] // Intermetallics. – 1999. – Vol. 7. – №10. – P. 1195-1202.

21. Щукин А. С. Исследование взаимодействия продуктов горения системы Ni-Al с тугоплавкими металлами W, Mo и Ta : дис. канд. техн. наук : 01.04.17 / Щукин Александр Сергеевич – Черноголовка, 2018. – 170 с.
22. Pettit F. S. Oxidation mechanisms for Ni-Al alloys at temperatures between 900° and 1300° C / F. S. Pettit // AIME Met. Soc. Trans. – 1967. – Vol. 239. – №. 9. – P. 1296-1305.
23. Grabke H. J. Oxidation of NiAl and FeAl / H. J. Grabke // Intermetallics. – 1999. – Vol. 7. – №. 10. – P. 1153-1158.
24. Grabke H. J. The oxidation of NiAl / H. J. Grabke, M. W. Brumm, B. Wagemann // Materials and Corrosion. – 1996. – Vol. 47. – №. 12. – P. 675-677.
25. Noebe R. D. Physical and mechanical properties of the B2 compound NiAl / R. D. Noebe, R. R. Bowman, M. V. Nathal. // International Materials Reviews. – 1993. – Vol. 38. – №4. – P. 193–232.
26. Синельникова В. С. Алюминиды / В. С. Синельникова, В. А. Подергин, В. Н. Речкин. – Киев: Нукова думка, 1965. — 226 с.
27. Косицын С. В. Фазовые и структурные превращения в сплавах на основе моноалюминида никеля / С. В. Косицын, И. И. Косицына. // Успехи физ. мет.. – 2008. – Т. 9. – С. 195–258.
28. Taylor A. Further studies on the nickel–aluminium system. I. β -NiAl and δ -Ni₂Al₃ phase fields / A. Taylor, N. J. Doyle. // Appl. Cryst.. – 1972. – №5. – P. 201–209.
29. “Order–order” kinetics in Ni_{50.5}Al_{49.5} single crystal / R.Kozubski, D. Kmiec, E. Partyka, M. Danielewski. // Intermetallics. – 2003. – №11. – P. 897–905.
30. Jia C. C. Partition of alloying elements between γ (Al), γ' (L12), and β (B2) phases in Ni-Al base systems / C. C. Jia, K. Ishida, T. Nishizawa. // Metallurgical and Materials Transactions A. – 1994. – Vol. 25. – №2. – P. 473–485.
31. Хагель В. Интерметаллические соединения / В. Хагель. – Москва: Металлургия, 1970. – 420 с.
32. Diffusion mechanism of iron in ternary (Ni,Fe)Al alloys with B2-structure / M.Rennhofer, B. Sepiol, W. Loser, G. Vogl. // Intermetallics. – 2003. – №11. – P. 573–580.

33. Helander T. A Phenomenological treatment of diffusion in Al-Fe and Al-Ni alloys having B2-b.c.c. ordered structure / T. Helander, J. Agren. // *Acta materialia*. – 1999. – Vol. 47. – №4. – P. 1141–1152.
34. Hancock B. F. Diffusion in the Intermetallic Compound NiAl / B. F. Hancock, B. R. McDonell. // *Phys. Status Solidi (a)*. – 1971. – №4. – P. 143–150.
35. Shankar S. Interdiffusion and intrinsic diffusion in the NiAl(γ) phase of the Al-Ni phase diagram. / S. Shankar, L. L. Siegle. // *Metal Trans A*. – 1978. – №9. – P. 1467–1476.
36. Farkas D. Atomistic simulation of point defects and diffusion in B2 NiAl Part II. Diffusion mechanisms / D. Farkas, Y. Mishin. // *Philosophical Magazine A*. – 1997. – Vol. 75. – №1. – P. 187–199.
37. Elcock E. W. Vacancy Diffusion in Binary Ordered Alloys / E. W. Elcock, C. W. McCombi. // *Physical Review*. – 1958. – №2. – P. 605–606.
38. Belova I. V. Diffusion in a model of an ordered alloy / I. V. Belova, M. E. Ivory, G. E. Murch. // *Philosophical Magazine A*. – 1995. – Vol. 72. – №4. – P. 871–880.
39. Lutze-Birk A. Diffusion of ^{114m}In in NiAl / A. Lutze-Birk, H. Jacobi. // *Scripta Metallurgica*. – 1975. – Vol. 9. – №7. – P. 761–765.
40. Kao C. R. On the composition dependencies of self-diffusion coefficients in B2 intermetallic compounds / C. R. Kao, Y. A. Chang. // *Intermetallics*. – 1993. – Vol. 1. – №4. – P. 237–250.
41. Multiscale modeling of material failure: Theory and computational methods / R. P. Budarapu, X. Zhuang, T. Rabczuk, S. P. Bordas // *Advances in Crystals and Elastic Metamaterials, Part 2*. – 2019. – (Elsevier). – (Advances in Applied Mechanics; vol. 52). – P. 7–16.
42. Smolyanitsky A. Numerical simulation of nanoscale systems and materials / A. Smolyanitsky, V. K. Tewary // *Modeling, Characterization and Production of Nanomaterials*. – 2015. – (Woodhead Publishing). – (Electronic and Optical Materials). – P. 87–111.

43. Semigrand Canonical and Kinetic Monte Carlo simulations of binary B2-ordered nano-films with triple defects / [P. Sowa, A. Biborski, R. Kozubski and others]. // *Intermetallics*. – 2014. – №55. – P. 40–48.
44. Baskes M. I. Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities / M. I. Baskes. // *Physical Review B*. – 1992. – Vol. 46. – №5. – P. 2727–2742.
45. Baskes M. I. Second nearest-neighbour modified embedded-atom method potential / M. I. Baskes, B.-J. Lee. // *Physical Review B*. – 2000. – Vol. 62. – P. 8564–8567.
46. Baskes M. I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals / M. I. Baskes, Murray S. Daw. // *Physical Review B*. – 1984. – Vol. 29. – №12. – P. 6443–6453.
47. LAMMPS [Електронний ресурс] – Режим доступу до ресурсу: <https://en.wikipedia.org/wiki/LAMMPS> (дата звернення 10.05.2020).
48. Basics of running LAMMPS [Електронний ресурс] – Режим доступу до ресурсу: https://lammps.sandia.gov/doc/Run_basics.html (дата звернення 10.05.2020).
49. Screen and logfile output [Електронний ресурс] – Режим доступу до ресурсу: https://lammps.sandia.gov/doc/Run_output.html (дата звернення 10.05.2020).
50. boundary command [Електронний ресурс] – Режим доступу до ресурсу: <https://lammps.sandia.gov/doc/boundary.html> (дата звернення 10.05.2020).
51. units command [Електронний ресурс] – Режим доступу до ресурсу: <https://lammps.sandia.gov/doc/units.html> (дата звернення 10.05.2020).
52. compute msd command [Електронний ресурс] – Режим доступу до ресурсу: https://lammps.sandia.gov/doc/compute_msd.html (дата звернення 10.05.2020).
53. ДБН В.2.2-28-2010 – Будинки адміністративного та побутового призначення : затв. наказом М-ва регіонального розвитку та будівництва України від 30 грудня 2010 р. № 570 та від 10 лютого 2011 р. № 23. Київ: Укрархбудінформ, 2011. 31 с.
54. Про затвердження Державних санітарних норм та правил «Гігієнічна класифікація праці за показниками шкідливості та небезпечності факторів виробничого середовища, важкості та напруженості трудового процесу» :

- наказ М-ва охорони здоров'я України від 08 квіт. 2014 р. № 248. *Офіційний вісник України*. 2014. № 41. С. 94.
55. ГОСТ 12.1.005-88. Загальні санітарно-гігієнічні вимоги до повітря робочої зони. [Чинний від 01-01-1989]. Москва, 1989. 32 с.
56. Про затвердження Вимог щодо безпеки та захисту здоров'я працівників під час роботи з екранними пристроями : наказ М-ва соціальної політики України від 14 лют. 2018 р. № 207. *Офіційний вісник України*. 2018. № 38. С. 121.
57. Гандзюк М.П. Основи охорони праці: Підручник. – 5-те вид./ М. П. Гандзюк, Є. П. Желібо, М. О. Халімовський // К.: Каравела, 2011. – 384 с.
58. Охорона праці та цивільний захист / О. Г. Левченко, О. І. Полукаров, В. В. Зацарний та ін. // За ред. О. Г. Левченка. – К.: Основа, 2019. – 472 с
59. Голінько В.І. Основи охорони праці: підручник / В.І. Голінько // М-во освіти і науки України; Нац. гірн. ун-т. – 2-ге вид. – Д.: НГУ, 2014. – 271 с.
60. ДБН В.2.5-28:2018 – Природне і штучне освітлення : затв. наказом М-ва регіонального розвитку, будівництва та житлово-комунального господарства України від 03 листопада 2018 р. № 264 Київ: Укрархбудінформ, 2019. 137 с.
61. Кодекс цивільного захисту України, затверджений Верховною Радою України від 02.10.2012р. № 5403-V.
62. НАПБ Б.03.002-2007 – Норми визначення категорій приміщень, будинків та зовнішніх установок за вибухопожежною та пожежною небезпекою : затв. наказом М-ва надзвичайних ситуацій від 03 грудня 2007 р. №833. *Бизнес и безопасность*. 2008. №1. С. 54.