DOI: 10.25712/ASTU.1811-1416.2019.02.006

УДК 538.911

КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ И ДИФФУЗИЯ В ОБЛАСТИ ТРОЙНЫХ СТЫКОВ ГРАНИЦ ЗЕРЕН В УСЛОВИЯХ НАЛИЧИЯ ПРИМЕСЕЙ ЛЕГКИХ ЭЛЕМЕНТОВ

И.В. Зоря¹, Г.М. Полетаев^{2†}, М.Д. Старостенков²

[†]gmpoletaev@mail.ru

¹Сибирский государственный индустриальный университет, ул. Кирова, 42, 654007, Новокузнецк, Россия ²Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, пр. Ленина, 46, 656038, Барнаул, Россия

Методом молекулярной динамики проведено исследование процессов кристаллизации и диффузии в области тройного стыка границ зерен в ГЦК металлах в условиях наличия примесных атомов углерода, азота и кислорода. В качестве ГЦК металлов рассматривались Ni, Ag и Al. Показано, что наличие примесей приводит к существенному замедлению скорости кристаллизации. Торможение примесными атомами фронта кристаллизации связано с локальной деформацией кристаллической решетки, которую они вызывают, и, как правило, чем больше эта деформация, тем сильнее примесные атомы тормозят кристаллизацию. Наибольшее влияние на скорость кристаллизации было замечено для алюминия. Для примесных атомов углерода характерным было образование агрегатов при достаточно высоких концентрациях. Фронт кристаллизации задерживался на данных агрегатах. Атомы кислорода и азота не образовывали агрегатов, тем не менее, вследствие вызываемых ими искажений кристаллической решетки, также сильно тормозили фронт кристаллизации. При изучении диффузии вдоль тройных стыков было выяснено, что с увеличением доли свободного объема в тройных стыках увеличивается коэффициент самодиффузии и диффузии примесных атомов вдоль стыка. Коэффициент диффузии примесных атомов вдоль тройных стыков оказался на порядок выше по сравнению с коэффициентом самодиффузии, что, по-видимому, обусловлено высокой подвижностью примесных атомов в разупорядоченной структуре тройных стыков, содержащей высокую долю свободного объема. В чистых кристаллах, в отличие от границ зерен и их тройных стыков, отдельные примесные атомы углерода и кислорода имеют низкую диффузионную подвижность.

Ключевые слова: молекулярная динамика, металл, примесь, тройной стык, кристаллизация, диффузия, свободный объем.

CRYSTALLIZATION AND DIFFUSION IN THE REGION OF TRIPLE JUNCTIONS OF GRAIN BOUNDARIES IN THE PRESENCE OF IMPURITIES OF LIGHT ELEMENTS

I.V. Zorya¹, G.M. Poletaev^{2†}, M.D. Starostenkov²

[†]gmpoletaev@mail.ru

¹Siberian State Industrial University, Kirova Str., 42, Novokuznetsk, 654007, Russia ²I.I. Polzunov Altai State Technical University, Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia

Crystallization and diffusion processes in the region of a triple junction of grain boundaries in fcc metals in the presence of impurity atoms of carbon, nitrogen and oxygen were studied by the method of molecular dynamics. Ni, Ag, and Al are considered as fcc metals. It is shown that the presence of impurities leads to a significant slowdown in the rate of crystallization. The inhibition of the crystallization front by impurity atoms is associated with the local deformation of the crystal lattice, which they cause, and, as a rule, the greater this deformation, the stronger the impurity atoms inhibit crystallization. The greatest influence on the rate of crystallization was observed for aluminum. For impurity carbon atoms, the formation of aggregates was typical at relatively high concentrations. The crystallization front lingered on these aggregates. The atoms of oxygen and nitrogen did not form aggregates; however, due to the distortions of the crystal lattice caused by them, they also strongly inhibited the crystallization front. When studying diffusion along triple junctions, it was found that with increasing fraction of free volume in triple junctions, the coefficient of self-diffusion coefficient of impurity atoms along the junction sturned out to be an order of magnitude higher compared to the self-diffusion coefficient, which is apparently due to the high mobility of impurity atoms in the disordered structure of triple junctions, which contains a high fraction of free volume. In pure crystals, in contrast to the grain boundaries and their triple junctions, individual impurity atoms of carbon and oxygen have low diffusion mobility.

Keywords: molecular dynamics, metal, impurity, triple junction, crystallization, diffusion, free volume.

Введение

Тройной стык границ зерен представляет собой линейный дефект, вдоль которого сопрягаются три границы зерен. Согласно экспериментальным данным, диффузия в области тройного стыка протекает значительно интенсивнее, чем вдоль самих границ [1]. При этом тройной стык содержит больше свободного объема по сравнению с образующими этот стык границами зерен [2]. В работах [3-5] было показано, что случае стыка малоугловых границ наклона избыточный свободный объем в процессе кристаллизации скапливается вблизи ядер зернограничных дислокаций, причем, чем ближе дислокация к месту стыка границ, тем больше она содержит избыточного свободного объема. Для стыка большеуловых границ характерно более равномерное распределение свободного объема вблизи стыка.

Взаимодействие примесных атомов легких элементов с металлами имеет большой научный и технологический интерес. Атомы углерода, азота, кислорода, даже при небольших концентрациях, существенно влияют на свойства металлов, что в первую очередь обусловлено их взаимодействием с дефектами кристаллической решетки. Несмотря на важность понимания механизмов и процессов, лежащих в основе влияния легирования примесями легких элементов на свойства металлов, в настоящее время остается много вопросов, касающихся поведения примесей на атомном уровне в металлической матрице.

Настоящая работа посвящена исследованию влияния примесных атомов углерода, азота и кислорода на процессы кристаллизации и диффузии в области тройных стыков границ наклона в ГЦК металлах Ni, Ag, Al. Этот набор из трех металлов уникален тем, что два из них имеют почти одинаковые радиусы атомов, тогда как другие два - почти одинаковые значения электроотрицательности. Радиусы атомов: Al – 1,43 Å, Ag – 1,44 Å, Ni – 1,24 Å [6]. Электроотрицательности (шкала Полинга): Al -1,61, Ag – 1,93, Ni – 1,91 Å [7]. Таким образом, при получении различных зависимостей для данных трех металлов будет видна взаимосвязь либо с размером атомов, либо с электроотрицательностью.

1. Описание модели

Тройной стык границ наклона создавался в центре расчетного блока путем сопряжения трех зерен, разориентированных относительно друг друга с помощью поворота вокруг оси параллельной линии тройного стыка. Рассматривались две оси разориентации: <111> и <100>. Начальные углы между границами в стыке задавались 120°. В течение молекулярнодинамического эксперимента границы могли мигрировать и углы в итоге могли отличаться от 120°. После вырезания сегментов (рис.1) проводилось сопряжение зерен, при котором удалялись атомы, находящиеся от соседнего атома на расстоянии менее 0,5 Å. Заключительным этапом являлось вырезание конечного расчетного блока в форме цилиндра. Радиус цилиндрического блока был равен 60 Å, длина – 20 Å. Количество атомов в блоке составляло примерно 20000. На границы расчетного блока вдоль оси наклона всех зерен, то есть вдоль тройного стыка, налагались линии граничные периодические условия (имитировалось бесконечное повторение цилиндрического расчетного блока вдоль оси Z). На боковую поверхность цилиндра были наложены жесткие условия, - атомы вблизи боковой поверхности В процессе компьютерного эксперимента оставались неподвижными (на рис.1 жестко закрепленные атомы показаны темно-серым цветом).



Рис.1. Пример цилиндрического расчетного блока, содержащего тройной стык границ наклона <111> 15°/15°/30°. Границы зерен обозначены белыми пунктирными линиями. Темно-серые атомы в процессе моделирования оставались неподвижными (жесткие граничные условия). На рисунке также показана расчетная область для вычисления коэффициента диффузии вдоль тройного стыка

Взаимодействия атомов металла друг с другом описывались многочастичными потенциалами Клери-Розато [8], построенными в рамках модели сильной связи. Для описания

взаимодействий атомов примесей легких элементов с атомами металла и атомов примесей друг с другом использовались парные потенциалы Морзе [9]. Оба потенциала хорошо зарекомендовали себя в ряде расчетов, выполненных методом молекулярной динамики [10-18]. Параметры потенциалов для описания взаимодействий примесных атомов C, N и O с атомами рассматриваемых металлов были взяты из [9], где они были найдены с учетом эмпирических зависимостей и известных характеристик, таких как температура плавления или разложения соответствующего химического соединения металла с легким элементом, энергия активации диффузии примесного атома в кристаллической решетке металла. Для описания взаимодействий атомов примеси друг с другом в металлах в [9] за основу были взяты потенциалы, предложенные другими авторами. Для связи С-С парный потенциал из [19] был трансформирован в потенциал Морзе. Для связей N-

N и О-О были взяты потенциалы из работ [20, 21].

2. Влияние примесей на процесс кристаллизации в области тройного стыка

Заключительным этапом создания тройного стыка являлось плавление и последующая кристаллизация расчетного блока. Расчетный блок нагревался до температуры, значительно превышающей температуру плавления (при задании той или иной температуры все межатомные расстояния в расчетном блоке изменялись в соответствии с коэффициентом теплового расширения). После того как моделируемый поликристалл становился жидким (рис.2а), включался термостат и проводилось выдерживание при постоянной температуре ниже температуры плавления, как правило, при $0,7 \cdot T_{nn}$, где T_{nn} – температура плавления.



Рис.2. Кристаллизация чистого никеля в области тройного стыка <111> 15°/15°/30° при температуре 1200 К: а) стартовое жидкое состояние с «жесткими стенками»; б) после моделирования 7 пс при температуре 1200 К; в) после 100 пс и последующего охлаждения

Жесткие границы (т.е. жестко закрепленные атомы на боковой поверхности цилиндрического расчетного блока) имитировали в данном случае фронты кристаллизации от трех центров кристаллизации (рис.2).

Скорость движения фронта кристаллизации на порядок ниже скорости звука, в связи с чем большинство дефектов формируется при кристаллизации в последнюю очередь – в метах сопряжения кристаллов с разной ориентацией, т.е. на границах зерен и тройных стыках. На рис.2 представлены изображения расчетного блока никеля в процессе кристаллизации в разные моменты времени. Видно, что область вблизи тройного стыка кристаллизуется в последнюю очередь. В этой области происходит концентрирование дефектов и свободного объема.

Примесные атомы легких элементов вводились на этапе жидкого состояния расчетного блока (рис.2а). Введение примесей приводило к существенному замедлению скорости кристаллизации, и если в Ni и Ag введение 10% примесей приводило к снижению скорости в несколько раз, то в Al кристаллизацию смоделировать не удавалось вовсе – металл оставался жидким в течение сравнительно длительного компьютерного эксперимента. На рис.3 изображены примеры распределения примесных атомов углерода и кислорода в области тройного стыка в никеле после моделирования кристаллизации при температуре 1200 К. Следует отметить особенности кристаллизации при содержании в металлах различных примесей. Для углерода характерным было образование агрегатов при достаточно высоких концентрациях примесных атомов. Фронт кристаллизации задерживался на данных агрегатах (рис.3а). Атомы кислорода и азота не образовывали агрегатов, тем не менее, вследствие вызываемых ими искажений кристаллической решетки, также сильно тормозили фронт кристаллизации.

Механизм торможения фронта кристаллизации примесными атомами заключается во внесении ими разупорядочивающего эффекта при образовании атомной структуры. Примесные атомы вызывают локальную деформацию, искажение кристаллической решетки. При этом наибольшие смещения атомов металла вблизи примеси в [9] наблюдались как раз в алюминии, а наименьшие – в серебре.



Рис.3. Распределение примесных атомов углерода (а) и кислорода (б) (черные атомы) при концентрации 10% в области тройного стыка в никеле после моделирования кристаллизации в течение 106 пс (а) и 777 пс (б) при температуре 1200 К

3. Диффузия вдоль тройных стыков в условиях наличия примесей

При исследовании диффузии вдоль тройных стыков внимание было преимущественно обращено на влияние избыточного свободного объема. Рассматривались два типа тройных стыков: <111> 15°/15°/30° и <100> 15°/15°/30°. Свободный объем вводился путем удаления определенного количества случайно выбранных атомов из расчетного блока еще на стадии расплавленного состояния (рис.2а). Затем моделировалась кристаллизация, при которой избыточный свободный объем концентрировался преимущественно в области тройного стыка.

Концентрация вводимых примесных атомов составляла 7%. При более высокой концентрации оказывалось проблематичным провести кристаллизацию расчетного блока Al. Продолжительность молекулярно-динамических экспериментов при определении коэффициентов диффузии составляла 300 пс, в течение которых температура расчетного блока оставалась постоянной – 0,9 *Т*_{пл} (1553 К для Ni, 1112 К для Ад и 840 К для Al). После основного эксперимента проводилось охлаждение расчетного блока для исключения тепловых смещений атомов. Коэффициент диффузии рассчитывался только вдоль оси Z, т.е. вдоль линии тройного стыка, в расчетной области радиусом 10 Å (рис.1). В [15] было показано, что диффузия вдоль тройного стыка протекает преимущественно в области радиусом примерно 5 Å. Однако введение примесей приводит к существенному расширению области стыка и увеличению его «диффузионного» радиуса.

На рис.4 приведены графики зависимостей коэффициента самодиффузии вдоль тройных стыков <111> 15°/15°/30° и <100> 15°/15°/30° от свободного объема в них при температуре 0,9. Т_{пл} и при наличии 7% атомов кислорода. Свободный объем измерялся в процентах удаленных до кристаллизации атомов и варьировался от 0% до 2%. Примечательно, что для трех разных металлов полученные значения и зависимости оказались схожими при одном и том же отношении температуры к температуре плавления металла. Тройные стыки границ наклона с осью разориентации <100> имели большую диффузионную проницаемость, чем стыки границ <111>. Аналогичный результат, но для зернограничной диффузии, был получен в [22].

Судя по полученным графикам, увеличение свободного объема приводит к повышению коэффициента диффузии. Об этом также говорилось в [15]. В [15] было, например, получено, что для тройных стыков, содержащих избыточный свободный объем, энергия активации самодиффузии ниже по сравнению со стыками без дополнительного свободного объема: 0,41 эВ для стыков границ <100> 18°/18°/36° и 0,43 эВ для стыков границ <111> 15°/15°/30°. Без введения дополнительных вакансий в расчетные блоки до кристаллизации рассматриваемые тройные стыки имели одинаковую энергию активации – 0,59 эВ.

Диффузия примесных атомов также ускоряется при увеличении свободного объема в тройном стыке (рис.5). При этом углерод диффундирует более интенсивно, чем атомы азота и кислорода. По всей видимости, этот эффект связан с тенденцией атомов углерода образовывать агрегаты, и после их формирования следует ожидать снижение диффузионной подвижности атомов углерода.



Рис.4. Графики зависимостей коэффициента самодиффузии вдоль тройных стыков от свободного объема в них при температуре $0,9 \cdot T_{nn}$ и при наличии 7% атомов кислорода: a) <111> 15°/15°/30°; б) <100> 15°/15°/30°. • - Ni, \circ - Ag, \triangle - Al



Рис.5. Графики зависимостей коэффициента диффузии примесных атомов кислорода вдоль тройных стыков от свободного объема в них при температуре $0,9 \cdot T_{nn}$: a) <111>15°/15°/30°; б) <100>15°/15°/30°. • - Ni, \circ - Ag, \triangle - Al

Коэффициент диффузии примесей углерода и кислорода вдоль границ зерен оказался на порядок выше по сравнению с коэффициентом самодиффузии, что, по-видимому, обусловлено высокой подвижностью примесных атомов в разупорядоченной структуре в области тройного стыка, содержащей высокую долю свободного объема. В чистых кристаллах, как было показано в [9], отдельные примесные атомы углерода и кислорода имеют низкую диффузионную подвижность и сравнительно высокие значения энергии активации диффузии.

Заключение

Методом молекулярной динамики проведено исследование процессов кристаллизации и диффузии в области тройного стыка границ зерен в ГЦК металлах в условиях наличия примесных атомов углерода, азота и кислорода. Показано, что наличие примесей приводит к существенному замедлению скорости кристаллизации. Торможение примесными атомами фронта кристаллизации связано с локальной деформацией кристаллической решетки, которую они вызывают, и, как правило, чем больше эта деформация, тем сильнее примесные атомы тормозят кристаллизацию. Наибольшее влияние на скорость кристаллизации было замечено для алюминия. Для примесных атомов углерода характерным было образование агрегатов при достаточно высоких концентрациях. Фронт кристаллизации задерживался на данных агрегатах. Атомы кислорода и азота не образовывали агрегатов, тем не менее, вследствие вызываемых ими искажений кристаллической решетки, также сильно тормозили фронт кристаллизации.

При изучении диффузии вдоль тройных стыков было выяснено, что с увеличением доли свободного объема в тройных стыках увеличивается коэффициент самодиффузии и диффузии примесных атомов вдоль стыка. Коэффициент диффузии примесных атомов вдоль тройных стыков оказался на порядок выше по сравнению с коэффициентом самодиффузии, что, по-видимому, обусловлено высокой подвижностью примесных атомов в разупорядоченной структуре тройных стыков, содержащей высокую долю свободного объема. В чистых кристаллах, в отличие от границ зерен и их тройных стыков, отдельные примесные атомы углерода и кислорода имеют низкую диффузионную подвижность [23-28].

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего

образования РФ в рамках базовой части государственного задания (проект №3.4820.2017/8.9).

Список используемой литературы

1. Palumbo G., Aust K.T. A coincident axial direction (CAD) approach to the structure of triple junctions in polycrystalline materials // Scripta Metallurgica et Materialia. – 1990. – V.24. – P. 1771–1776.

2. Гусев А.И. Эффекты нанокристаллического состояния в компактных металлах и соединениях // Успехи физических наук. – 1998. – Т.168, №1. – С. 55–83.

3. Полетаев Г.М., Новоселова Д.В., Кайгородова В.М., Старостенков М.Д. Особенности образования свободного объема в тройных стыках границ наклона <111> и <100> в Ni при кристаллизации // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2015. – Т.12, №2. – С. 253–258.

4. Полетаев Г.М., Новоселова Д.В., Зоря И.В., Старостенков М.Д. Исследование формирования избыточного свободного объема в тройных стыках границ зерен при кристаллизации на примере никеля // Физика твердого тела. – 2018. – Т.60, №5. – С. 846–850.

5. Poletaev G.M., Novoselova D.V., Kaygorodova V.M. The causes of formation of the triple junctions of grain boundaries containing excess free volume in fcc metals at crystallization // Solid State Phenomena. -2016. - V.249. - P. 3-8.

6. Goldschmidt H.J. Interstitial Alloys. – London: Butterworths, 1967. – 640 p.

7. Pauling L. The Nature of the Chemical Bond, Third Edition. – Ithaca: Cornell University Press, 1960. – 664 p.

8. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // Physical Review B. – 1993. – V.48, No.1. – P. 22–33.

9. Зоря И.В., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Примесные атомы легких элементов в кристаллах металлов: молекулярно-динамическое моделирование // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2018. – Т.15, №4. – С. 526–532.

10. Poletaev G., Zorya I., Rakitin R. Molecular dynamics study of migration mechanism of triple junctions of tilt boundaries in fcc metals // Computational Materials Science. – 2018. – V.148. – P. 184–189. 11. Полетаев Г.М., Зоря И.В., Старостенков М.Д., Ракитин Р.Ю., Табаков П.Я. Молекулярно-динамическое исследование миграции границ зерен наклона в Ni и Ni₃Al // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2019. – Т.155, №1. – С. 96–102.

12. Poletaev G.M., Zorya I.V., Novoselova D.V., Starostenkov M.D. Molecular dynamics simulation of hydrogen atom diffusion in crystal lattice of fcc metals // International Journal of Materials Research. – 2017. – V.108, No.10. – P. 785–790.

13. Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Определение температуры плавления и температурного коэффициента линейного расширения методом молекулярной динамики // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2004. – Т.1, №1. – С. 81–85.

14. Poletaev G.M., Starostenkov M.D., Dmitriev S.V. Interatomic potentials in the systems Pd-H and Ni-H // Materials Physics and Mechanics. -2016. - V.27, No.1. -P.53-59.

15. Полетаев Г.М., Дмитриенко Д.В., Санников А.В., Старостенков М.Д. Определение диффузионного радиуса и диффузионной проницаемости ненапряженных тройных стыков границ зерен в никеле в условиях деформации // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2014. – Т.11, №1. – С. 17–21.

16. Кулабухова Н.А., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Взаимодействие атома водорода с краевой дислокацией в Рd и Ni // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2014. – Т.11, №1. – С. 99–104.

17. Полетаев Г.М., Кулабухова Н.А., Старостенков М.Д. Потенциалы межатомного взаимодействия в системах Рd-H и Ni-H // Химическая физика и мезоскопия. – 2011. – Т.13, №3. – С. 411–418.

18. Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Структурные изменения тетраэдров дефектов упаковки при поглощении точечных дефектов // Письма в ЖТФ. – 2009. – Т.35, №1. – С. 3–10. 19. Ruda M., Farkas D., Garcia G. Atomistic simulations in the Fe–C system // Computational Materials Science. – 2009. – V.45. – Р. 550–560.

20. Vashishta P., Kalia R.K., Nakano A., Rino J.P. Interaction potentials for alumina and molecular dynamics simulations of amorphous and liquid alumina // Journal of Applied Physics. – 2008. – V.103. - P.083504.

21. San Miguel M.A., Sanz J.F. Moleculardynamics simulations of liquid aluminum oxide // Physical Review B. – 1998. – V.58. – P. 2369– 2371.

22. Полетаев Г.М., Юрьев А.Б., Громов В.Е., Старостенков М.Д. Атомные механизмы структурно-энергетических превращений вблизи границ зерен наклона в ГЦК металлах и интерметаллиде Ni₃Al. – Новокузнецк: Изд-во Сиб-ГИУ, 2008. – 160 с.

23. Старостенков М.Д. Кристаллогеометрическое описание планарных дефектов в сверхструктурах: Автореф. дис. ... д-ра физ.мат. наук. – Барнаул, 1994. – 85 с.

24. Старостенков М.Д., Дмитриев С.В. Распределение пространственных многогранников по координационным сферам в ОЦК-решетке // Журнал структурной химии. – 1993. – Т.34, №4. – С. 107.

25. Кулагина В.В., Чаплыгина А.А., Попова Л.А., Старостенков М.Д., Потекаев А.И., Клопотов А.А. Структурно-фазовые превращения сплавов системы Си-Рt при атомном упорядочении // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2012. – Т.55, №7. – С. 78–87.

26. Багаутдинов А.Я., Викарчук А.А., Вихорь Н.А., Будовских Е.А., Воробьев С.В., Глезер А.М., Головин Ю.И., Громов В.Е., Громова А.В., Гун Г.С., Данилов В.И., Иванов Ю.Ф., Кареев С.И., Карыев Л.Г., Зуев Л.Б., Кислицин С.Б., Клубович В.В., Клопотов А.А., Ковалевская Т.А., Коваленко В.В. и др. Структура и свойства перспективных металлических материалов. – Томск, 2007. – 580 с.

27. Безносюк С.А., Потекаев А.И., Старостенков М.Д. Теоретические основы компьютерного наноинжиниринга биомиметических наносистем : монография / М. С. Жуковский [и др.]; Алтайский гос. ун-т [и др.]. – Томск, 2011. – 236 с.

28. Потекаев А.И., Старостенков М.Д., Кулагина В.В. Влияние точечных и планарных дефектов на структурно-фазовые превращения в предпереходной слабоустойчивой области металлических систем. – Томск, 2014. – 486 с.

Поступила в редакцию 28.05.19.

Сведения об авторах

Зоря Ирина Васильевна, к.т.н., доцент СибГИУ, zorya.i@mail.ru

Полетаев Геннадий Михайлович, д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой АлтГТУ, gmpoletaev@mail.ru Старостенков Михаил Дмитриевич, д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой АлтГТУ, genphys@mail.ru