

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**
«Северо-Восточный федеральный университет имени М.К. Аммосова»
Политехнический институт (филиал) ФГАОУ ВО «Северо-Восточный
федеральный университет имени М.К. Аммосова» в г. Мирном
Муниципальное образование «Мирнинский район»
АК «АЛРОСА» (ПАО)
ПАО НК «Роснефть»
ООО «Таас-Юрях Нефтегазодобыча»

**SCIENCE AND INNOVATIVE
DEVELOPMENT OF THE NORTH**

**НАУКА И ИННОВАЦИОННЫЕ
РАЗРАБОТКИ – СЕВЕРУ**

The 2nd INTERNATIONAL SCIENTIFIC CONFERENCE
II Международная научно-практическая конференция
«Наука и инновационные разработки-Северу», 14-15 марта 2019 г.,
посвященная 25-летию Политехнического института (филиала)
«Северо-Восточный федерального университета имени М.К. Аммосова»
в г. Мирном

Сборник материалов конференции в 2х частях

Часть I

PART I

- SECTION 1 EXPLOITATION TECHNOLOGIES OF MINERAL
DEPOSITS**
**SECTION 2 INNOVATIVE TECHNOLOGIES IN ELECTRICITY AND
INDUSTRIAL AUTOMATION**
**SECTION 3 MODERN ENGINEERING SOLUTIONS OF GEOLOGY
AND GEOPHYSICS AND MINERAL PROCESSING**

Общая редакция:

докт. техн. наук *Зырянов И.В.*
канд. геол.-мин. наук *Соловьев Е.Э.*
канд. физ.-мат. наук *Егорова А.А.*

Мирный, 2019

УДК 338.45:00.1(571.56)
ББК 65.305.1-55(2Рос.Яку)я43+72
НЗ4

Наука и инновационные разработки – Северу: II Международная научно-практическая конференция, «Наука и инновационные разработки-Северу», 14-15 марта 2019 г., посвященная 25-летию Политехнического института (филиала) «Северо-Восточного федерального университета имени М.К. Аммосова» в г. Мирном: сборник материалов конференции в 2-х частях, часть I/ Общ.ред. Зырянов И.В., Соловьев Е.Э., Егорова А.А.- Мирный Издательство, Мирнинская городская типография, 2019.- ч. 1 – 272 стр., ч. 2 – 284 стр.

Сборник содержит материалы исследований и практических рекомендаций по ключевым аспектам горно-обогатительного производства, энергоэффективным технологиям, эколого-инновационным решениям, по восполнению минерально-сырьевой базы добычи полезных ископаемых для использования и интеграции перспективных технологий в образовательный процесс, а также материалы, посвященные проблемам экологии, философии, психологии, педагогики и лингвистики.

Материалы, представленные в сборнике, рассчитаны на широкий круг специалистов, занимающихся данной проблематикой.

РЕДАКТОРСКАЯ ГРУППА:

Гадоев М.Г., д.ф.-м.н., Гольдман А.А., к.ф.н., Егорова А.А., к.ф.-м.н., Зырянов И.В., д.т.н., Павлова С.Н., к.э.н., Семенов А.С., к.ф.-м.н., Соловьев Е.Э., к.г.-м.н., Томский К.О., к.т.н., Халтаева О.Р., к.филос.н., Якушев И.А., к.ф.-м.н.

ISBN 978-5-903495-24-5

*Мероприятие проводится при финансовой поддержке Российского фонда
фундаментальных исследований, проект №19-011-20080*

© Политехнический институт (филиал) ФГАОУ ВО
«Северо-Восточный федеральный университет
имени М.К. Аммосова» в г. Мирном, 2019

11. Medvedev N.N. Exciting discrete breathers of two types in a computer 3D model of Pt_3Al crystal / N.N. Medvedev, M.D. Starostenkov, P.V. Zakharov, S.V. Dmitriev // Technical physics letters. – 2015. – Т. 41, № 10. – Р. 994–997.
13. Старостенков М.Д. Динамика дискретных бризеров в кристалле Pt_3Al / М.Д. Старостенков, А.И. Потеев, С.В. Дмитриев // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2015. – Т. 58, № 9. – С. 136–140.
14. Zhou X.W. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited $CoFe/NiFe$ multilayers / X.W. Zhou, R.A. Johnson, H.N.G. Wadley // Physical Review B. – 2004. – Vol. 69. – Р. 144113.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ ЛЕГКИХ ЭЛЕМЕНТОВ В КРИСТАЛЛАХ МЕТАЛЛОВ

Зоря И.В.¹, Полетаев Г.М.², Старостенков М.Д.²

¹СибГИУ, г. Новокузнецк; ²АлГТУ им. И.И. Ползунова, г. Барнаул

Взаимодействие примесных атомов с металлами представляет собой значительный научный и технологический интерес, который имеет широкий диапазон применений в материаловедении. Атомы легких элементов (прежде всего, наиболее распространенных: водорода, кислорода, азота, углерода), образуя в металлах дефекты и фазы внедрения, обладают высокой химической активностью и уже при низких концентрациях сильно влияют на свойства металлов. Являясь эффективными стопорами вакансий, дислокаций, границ зерен, примеси легких элементов значительно повышают прочность, твердость, фрикционные свойства одновременно, как правило, с хрупкостью [1, 2]. Для многих сплавов внедрения характерна высокая температура плавления и химическая стойкость. 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. В частности, остаются недостаточно изученными вопросы, связанные с механизмом и характеристиками диффузии примесных атомов в кристаллической решетке металлов с участием и без различных дефектов. В этом случае эффективным инструментом исследований является компьютерное моделирование.

Настоящая работа посвящена исследованию с помощью молекулярно-динамического моделирования структурно-энергетических характеристик и диффузии примесных атомов легких элементов C, N, O в кристаллах металлов с ГЦК решеткой Ni, Ag и Al. Моделирование проводилось с помощью метода молекулярной динамики. Расчетный блок кристаллов имел форму параллелепипеда и содержал 8400 атомов. Граничные условия использовались периодические. Взаимодействия атомов металла друг с другом описывались многочастичными потенциалами Клерри-Розато [3], построенными в рамках модели сильной связи. Для описания взаимодействий атомов примесей легких элементов с атомами металла и атомов примесей друг с другом были выбраны парные потенциалы Морзе. Оба потенциала хорошо зарекомендовали себя в ряде расчетов, выполненных методом молекулярной динамики [4–7].

Параметры потенциалов для описания взаимодействий примесных атомов C, N и O с атомами рассматриваемых металлов были взяты из [8], 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.

ГЦК и ГПУ кристаллические решетки, как известно, являются наиболее компактными для простых веществ. Коэффициент компактности (отношение объема атомов в элементарной ячейке к общему объему ячейки) для них равен 0,74. Оставшийся объем приходится на, так называемые, поры или пустоты, которые подразделяют на октаэдрические (рис. 1а) и тетраэдрические (рис. 1б). Условный радиус (радиус вписанной в пору сферы при условии, что

атомы в кристаллической решетке – твердые шары) октаэдрической поры составляет 0,41, а тетраэдрической – 0,22 радиуса атома [9].

Атомы С, N и O имеют близкие значения радиусов: 0,77 Å для С, 0,71 Å для N и 0,65 Å для O [1]. Согласно многочисленным исследованиям, примесные атомы С, N, O занимают октаэдрические пустоты в ГЦК решетке металлов [1, 2]. Для рассматриваемых примесей были рассчитаны энергии связи в октаэдрических и тетраэдрических порах. Было выяснено, что расположение примесных атомов в октапорах, действительно, является существенно энергетически выгодней, чем в тетрапорах, – разница энергии примесных атомов в них отличалась примерно на 1 эВ.

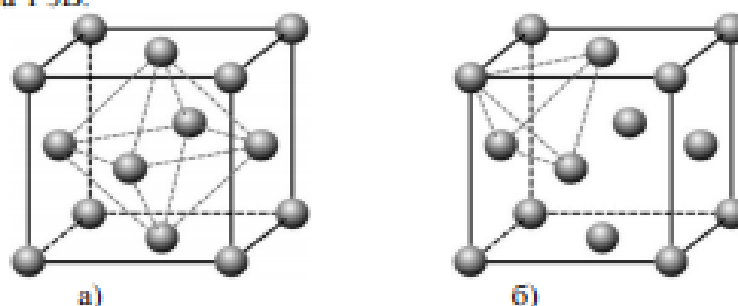


Рис. 1. Октаэдрическая (а) и тетраэдрическая (б) поры в ГЦК решетке.

На рис. 2 изображены диаграммы смещений атомов металла из узлов кристаллической решетки вблизи примесного атома. Сравнивая три примеси С, N и O, следует заметить, что чем меньше радиус атома примеси (он уменьшается от С к O), тем меньше деформация решетки. Это влияние радиуса атома примеси увеличивается при увеличении глубины потенциала.

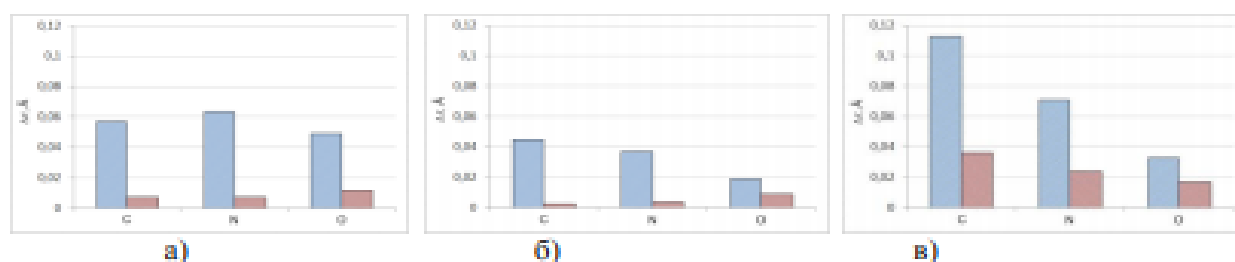


Рис. 2. Смещения атомов металла в первом (первые столбцы) и втором (вторые столбцы) соседствах вблизи примесного атома: а) в Ni, б) в Ag, в) в Al.

Локализация смещений вблизи примеси (т.е. соотношение смещений в первом и втором соседствах) зависит, по всей видимости, помимо указанных факторов еще от жесткости связей в самом металле (что в свою очередь определяется глубиной потенциала связей атомов металла друг с другом и упругими константами металла).

В [5] при изучении диффузии водорода в Pd и Ni нами рассматривалось два механизма диффузии примесного атома из одной октаэдрической поры в другую (рис. 2): 1 – по прямой вдоль направления $\langle 110 \rangle$ и 2 – через тетраэдрическую пору. Очевидно, что миграция более крупных примесных атомов С, N, O из одной октаэдрической поры в другую может осуществляться только по 2-й траектории.

Энергия миграции примесного атома определялась как разность расчетных ячеек, содержащих атом примеси в октаэдрической поре и в позиции перевальной точки, в центре равностороннего треугольника, образованного атомами металла (рис. 2). В обоих случаях, перед расчетом энергий, проводилась релаксация структуры и последующее охлаждение до 0 К. Полученные результаты приведены в таблице 1. Для сравнения, энергии активации диффузии атома углерода в Ni и γ -Fe, полученные экспериментально: в Ni – 1,49-1,75 эВ, в γ -Fe – 1,4-1,53 эВ [10, 11].

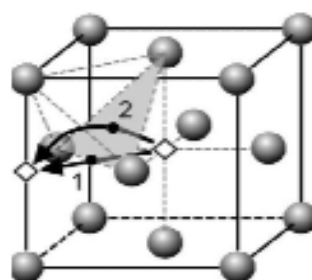


Рис. 2. Две возможные траектории миграции примесного атома из одной октаэдрической поры в соседнюю.

Таблица 1. Энергия миграции примесных атомов C, N, O в Ni, Ag, Al (эВ).

	C	N	O
Ni	1,57	1,86	2,04
Ag	1,43	1,64	1,87
Al	1,34	1,51	1,76

Как видно из таблицы, энергия диффузии уменьшается от Ni к Al, что связано с прочностью связей и, соответственно, глубиной потенциалов взаимодействия атомов металла друг с другом, - она также уменьшается от Ni и Al (как, например, и температура плавления). Наибольшие значения энергии активации получены для атомов кислорода, что связано со сравнительно более крепкими связями атомов металла с атомом кислорода по сравнению с другими примесями.

Таким образом, в настоящей работе получены следующие результаты. Показано, что расположение примесных атомов в октапорах является значительно энергетически выгодней, чем в тетрапорах, - разница энергии примесных атомов в них отличается примерно на 1 эВ. Чем меньше радиус атома примеси (он уменьшается от C к O), тем меньше деформация кристаллической решетки вокруг примеси, причем это влияние радиуса атома примеси увеличивается при увеличении глубины межатомного потенциала.

Для рассматриваемых примесных атомов найдены энергии активации диффузии в кристаллических решетках Ni, Ag и Al. Показано, что энергия диффузии примеси уменьшается от Ni к Al, что связано с прочностью связей и, соответственно, глубиной потенциалов взаимодействия атомов металла друг с другом. Наибольшие значения энергии активации получены для атомов кислорода.

Список литературы:

1. Goldschmidt H.J. Interstitial Alloys. / H.J. Goldschmidt. - London: Butterworths, 1967. - 640 p.
2. Toth L.E. Transition metal carbides and nitrides. / L.E. Toth. - New York: Academic Press, 1971. - 276 p.
3. Cleri F. Tight-binding potentials for transition metals and alloys / F. Cleri, V. Rosato // Physical Review B. - 1993. - V.48, №1. - P. 22-33.
4. Poletaev G.M. Interatomic potentials in the systems Pd-H and Ni-H / G.M. Poletaev, M.D. Starostenkov, S.V. Dmitriev // Materials Physics and Mechanics. - 2016. - V.27, №1. - P. 53-59.
5. Poletaev G.M. Molecular dynamics simulation of hydrogen atom diffusion in crystal lattice of fcc metals / G.M. Poletaev, I.V. Zorya, D.V. Novoselova, M.D. Starostenkov // International Journal of Materials Research. - 2017. - V.108, №10. - P. 785-790.
6. Poletaev G. Molecular dynamics study of migration mechanism of triple junctions of tilt boundaries in fcc metals / G. Poletaev, I. Zorya, R. Rakitin // Computational Materials Science. - 2018. - V.148. - P. 184-189.

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

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

9. Ашкрофт Н. Физика твердого тела. Т.1. / Н. Ашкрофт. - 1979. - Москва: Мир. - 458 с.

10. Лариков Л.Н. Диффузия в металлах и сплавах. / Л.Н. Лариков, В.И. Исайчев. - Киев: Наукова думка, 1987. - 511 с.

11. Askill J. Tracer diffusion data for metals, alloys and simple oxides. / J. Askill. - New York: Plenum Press, 1970. - 107 p.

ВЫСОКОВОЛЬТНЫЙ БЛОК ПИТАНИЯ НА ТРАНСФОРМАТОРЕ С ОБРАТНОЙ СВЯЗЬЮ

Ким Д.Ч., Семенов А.С., Татаринев П.С.

МПТИ (ф) СВФУ им. М.К. Аммосова, г. Мирный

Трансформаторы с обратной связью (FBT) или трансформаторы с линейным выходом широко используются в самых разнообразных научных, технических и бытовых высоковольтных устройствах: в двигателях на коронном разряде, электрогидравлическом ударе, телевизорах и компьютерных мониторах с электронно-лучевой трубкой [1] и т.д. Они очень полезны для создания импульсных высоковольтных источников питания.

FBT - это трансформаторы с воздушным зазором в ферритовом сердечнике, который увеличивает сопротивление сердечника и увеличивает его способность накапливать магнитную энергию. Это означает, что FBT действует как чистый индуктор в течение половины своего цикла, а затем действует как чистый трансформатор в течение другой половины цикла, то есть они передают энергию во вторичную систему и сохраняют энергию в течение значительного периода времени.

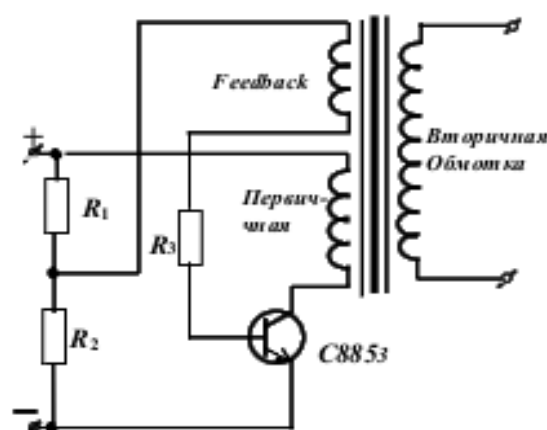


Рис. 1. Схема драйвера FBT на одном мощном биполярном транзисторе

FBT нельзя напрямую подключить к сети 220 В, потому что для работы ему нужна высокая частота от 15 до 50 кГц. Для питания FBT требуется собрать драйвер. Существует множество различных схем драйверов, которые можно использовать с FBT. Есть несколько очень простых и очень сложных конструкций, которые позволяют управлять частотой возбуждения, напряжением, током и т.д. В данной работе собраны и испытаны две из них.