

DOI 10.31489/2023No4/125-132

UDC 536.36, 538.9, 544.3.01, 544.22, 544.77

FRactal Nanoparticles of Phase-Separating Solid Solutions: Morphology-Dependent Phase Equilibria in Tungsten Heavy Pseudo-Alloys

Shishulin A.V.^{1,2*}, Potapov A.A.^{3,4}, Shishulina A.V.⁵¹Pleiades Publ., Ltd., Moscow, Russia,²G.A. Razuvaev Institute of Organometallic Chemistry, Russian Academy of sciences, Nizhny Novgorod, Russian Federation, chichouline_alex@live.ru³V.A. Kotel'nikov institute of radio engineering and electronics, Russian Academy of sciences, Moscow, Russian Federation⁴JNU-IREE RAS Joint Laboratory of Information Technology and Fractal Processing of Signals, Jinan University, Guangzhou, China⁵R.E. Alekseev Nizhny Novgorod State Technical University, Nizhny Novgorod, Russian Federation

In this paper, we simulate thermodynamically the morphology-dependent phase equilibria in core-shell nanoparticles of a phase-separating solid solution using the example of W-Cr heavy alloy. The morphology of a nanoparticle is described in the framework of the fractal geometry methods. It is shown that there are two possible heterogeneous states in a nanoparticle while the compositions of phases in both states differ from each other. The dependences of mutual solubilities of components on the temperature are obtained while the behavior of these dependences significantly differs depending on the particular state and the morphology of nanoparticle under consideration. In nanoparticles of a very complicated morphology, the phase separation itself gets suppressed and the nanoparticle remains in the homogeneous state at the temperatures significantly below the macroscopic value of the upper critical dissolution temperature. The demonstrated regularities are explained based on three mechanisms of reducing the free energy of the system and the "competition" between them. In the final section, a method for calculating the equilibrium size distributions and average characteristics of nanoparticle ensembles is described along with a technique of measuring nanoparticle fractal dimensions based on the microscopy data.

Keywords: nanoparticles, phase separation, tungsten, chromium, fractal dimension.

1. Introduction

In recent years, one of the main development vectors of the contemporary metalphysics is represented by investigating the unique set of properties of nanoparticle-fabricated samples which are resulted from the formation an ultrafine-grained structure in such materials. The structure of this type is generally obtained using the up-to-date additive powder metallurgy technologies [1-5] including the selective laser melting (SLM), selective laser sintering (SLS) and, especially, spark plasma sintering (SPS) methods [1, 2]. The last technique consists in the high-rate heating of nanopowders in a special conducting (graphite) mold due to the propagation of short (dozens of milliseconds) high-power current pulses through it. The sintering is carried out in the vacuum or in the atmosphere of an inert gas, the one-axis pressure being applied to the sample at the same time. An ultrafine-grained structure is obtained and the grain growth process is hampered in the case of the considered technologies as a result due to the possibility of dramatically high heating rates (up to 2000 – 2500 °C/min). It also necessary to mention that the SPS technology provides a number of "knobs" which make it possible to influence on the key characteristics of the obtained nanostructure of a metal sample through tuning the value of the applied pressure, heating temperature and heating time, heating and cooling rates etc. even in the course of the sintering process.

One of the primary objects of applying the developed additive manufacturing methods are the nanostructured tungsten-based heavy pseudo-alloys (the components of those are boundedly soluble in each other while the material is obtained using the different methods from the direct alloying) including the $W_{1-x}Cr_x$ ones [1-4, 6, 7]. Along with the significant fracture resistance under the dynamic loading conditions [6], the alloys of this system are characterized, for example, by the possibility of self-passivation [1] and a

dramatically high corrosion resistance at high temperatures [1, 2]. These ones and many other features [4] together provide a large number of biomedical, construction and special applications for such alloys.

At the macroscopic scale, the $W_{1-x}-Cr_x$ do not form a continuous series of solid solutions and undergo the phase separation with the upper critical dissolution temperature (UCDT) at 1906 K without any intermetallic phases [1, 7-9]. In the case of the additive powder metallurgy technologies being applied, the primary ways of controlling the physico-chemical properties of such materials consist in the formation of super-saturated solid solutions [1, 4] as well as of grain-boundary segregations with excessive contents of the dissolved component [7]. At the same time, in the analysis of phase equilibria in systems of a small volume, it is necessary to take into account several characteristic features. These peculiarities manifest themselves in significant dependences of mutual solubilities of components and equilibrium volume fractions of co-existing phases on the volume [9-20], shape of a nanoparticle [12-14, 18], thermodynamical characteristics of the surrounding environment [20] and several other factors [15, 17, 19]. The equilibrium phase compositions of small-volume systems are significantly different from the phase compositions of the same systems in the bulk state and can be modeled using the methods of equilibrium chemical thermodynamics [21] and several other approaches [22] (the applicability of thermodynamical methods in the analysis of phase equilibria in small-volume systems as well as their applicability limits are discussed in [23]). The experimental observations of the abovementioned effects are described, for example, in [24, 25].

2. Mathematical model of the phase separation in nanoscale particles

In the bulk state, the phase equilibria in the $W_{1-x}-Cr_x$ system are represented by the classical Becker curve [1, 8, 9]: the components are boundedly soluble in each other below the temperature of ~ 1906 K. As the system to be modeled below, we consider equiatomic nanoparticles of various shapes; below the UCDT, the nanoparticle contains a spherical-shaped inclusion (which is hereinafter referred as “core-phase”) of a solid-solution surrounded by a solid-solution layer (“shell-phase”) of a given shape. The nanoparticle volume is characterized by the effective diameter (d_{eff} , the diameter of the sphere, the volume of which being equal to the one of the considered nanoparticle). In a closed binary system with the *core-shell* configuration, the conservation conditions of matter interrelate the nanoparticle effective diameter, total amount of matter in the system (n), numbers of moles of each component (n_i , indices $i=1, 2$ correspond to chromium and tungsten, respectively) and concentrations of components i in phases j (x_{ij} , indices $j=c, s$ correspond to *core-* and *shell-*phases, respectively) [18]:

$$\pi d_{eff}^3/6 = \sum_j V_j, \quad n_1 = xn, \quad n_2 + n_1 = n, \quad n_i = \sum_j n_{ij}, \quad V_j = \sum_i n_{ij} V_i, \quad x_{ij} = n_{ij} / \sum_i n_{ij}. \quad (1)$$

Here, V_j and V_i are the volume of phase j and the molar volume of component i , respectively. The molar volumes are $V_1 = 7.23 \text{ cm}^3/\text{mol}$, $V_2 = 9.53 \text{ cm}^3/\text{mol}$. $x=0.5$ in the case of equiatomic particles [9, 15].

In order to provide a general description of all the possible nanoparticle geometric configurations including the most complicated and irregular ones, the fractal geometry approach is used [18, 26-28]. In the framework of this approach, the nanoparticle shape is characterized by its fractal dimension D which relates its surface area A_s to its volume (effective diameter d_{eff}): $A_s = C(\pi d_{eff}^3/6)^{2/D}$. Without any losses of generality, constant C is assumed to be $C = 4\pi$ [18, 26-28]. For regular simple structures, $D \equiv 3.00$, in their turn, the structures of a complicated and irregular morphology correspond to the values of $D < 3.00$ while D is also non-integer.

The examples of structures with various D are given in Refs. [27, 28]. Fractal dimension D of a nanoparticle can also be expressed in terms of the nanoparticle surface-to-volume ratio (k): $k(V, D) = V^{2/D} / (3V/4\pi)^{2/3}$, $V = \pi d_{eff}^3/6$. The nanoparticles of 40 nm in effective diameter and fractal dimensions of 2.60, 2.75 and 2.90 correspond to the surface-to-volume ratio values of 2.51, 1.72 and 1.23, respectively.

In the considered system, the characteristics of the equilibrium state are obtained by minimizing the Gibbs function (g) per one mole of matter including the energy contributions of all interface boundaries:

$$g = \sum_j (n_{1j} + n_{2j}) G_j(x_{1j}, T) + \sigma_s A_s + \sigma_c A_c, \quad (2)$$

$$G_j(x_{1j}, T) = A_1 x_{1j} (1 - x_{1j}) + A_{II} x_{1j}^2 (1 - x_{1j}) + A_{III} x_{1j} (1 - x_{1j})^2 + RT (x_{1j} \ln x_{1j} + (1 - x_{1j}) \ln (1 - x_{1j})).$$

Here, σ_{cs} and σ_s are the surface energies of the inner (*core-shell*) and outer (*shell-*) interface boundaries while R is the universal gas constant. The parameters A_I , A_{II} , A_{III} are as follows: $A_I = 30202.0$; $A_{II} = 2635.5$; $A_{III} = 0$ [9, 15]. The energies of interface boundaries are calculated using the first approximation (this approach and the obtained results are not accompanied by any losses of generality, see also [17, 19]): $\sigma_{cs} = 0.5 \sum_j \sigma(x_{1j})$, $\sigma(x_{1j}) = \sigma_1 x_{1j} + \sigma_2 (1 - x_{1j})$, $\sigma_s = \sigma_1 x_{1s} + \sigma_2 (1 - x_{1s})$. Here, $\sigma_1 = 0.657 \text{ J/m}^2$, $\sigma_2 = 1.110 \text{ J/m}^2$ [9, 15].

In the case of the properties of small-volume systems being considered in the framework of the thermodynamical approach, the problem of the thermodynamics applicability at the nanoscale and its lower boundary cannot be ignored. As the authors of [23] have noted, it is the most appropriate to apply the theoretical approaches based on the fluctuation theory to determine the applicability limits of chemical thermodynamics. Indeed, spontaneous fluctuations of thermodynamical characteristics (associated with the discreteness of the atomic-molecular structure of any system, being increased with a decrease in the amount of the matter which forms the system) represent the natural limitations on the application of thermodynamical approaches: if the fluctuation values of a parameter get comparable with the values of the parameter, this fact testifies, on the one hand, to the inadequate application of the thermodynamics techniques in this case, on the other hand, to the instability of the considered system itself as well as to the tendency of its decomposition due to fluctuations.

In [23], the authors have analyzed the fluctuations of temperature and surface tension of nanostructures. The temperature is taken into account by the authors (instead of the density, for example) due to the fact that the temperature plays the role of the “only state parameter introduced in the thermodynamics in addition to the mechanical variables such as pressure P and volume V ” for simple systems. Meanwhile, the structure stability of small-volume systems directly depends on the value of a temperature fluctuation. In order to estimate the absolute value of the root-mean-square temperature fluctuation δT , the following expression can be used: $\delta T = T \sqrt{R/C_X N}$. Here, X is the variable (or the set of variables) which remain constant in the considered case; N is the number of molecules and atoms which are contained in the considered systems; R is the universal gas constant; C_X is the molar heat capacity at $X = \text{const}$. In [23], it is assumed that $X = P$ while the isobaric molar heat capacity is included into the abovementioned expression (in the considered case, the surface contribution to the heat capacity of a nanosystem is not taken into account since the value of the temperature derivative of the surface enthalpy (introduced for the first time by E. Guggenheim) does not exceed a fraction of a cent of heat capacity C_p according to the authors’ early assessments). The results of calculating δT are given in Table 1 of [23] where nanoscale droplets of n -butane and solid nanoscale aluminum and sodium particles have been used as model systems. The calculations show that the value of δT does not exceed a few percent in all the three cases even for a system containing $N = 100$ atoms or molecules (δT decreases with an increase in N).

In their turn, the following expression is used in order to calculate the relative fluctuations $\Delta\sigma/\sigma$ of the surface tension:

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma} = \begin{cases} \sqrt{\frac{kT\beta_T}{12\pi r^3}}, & r \leq r_{ch} \\ 0, & r > r_{ch} \end{cases}$$

where k is the Boltzmann constant; r is the radius of a nanoparticle; β_T is the isothermal compressibility; r_{ch} is the characteristic size determined as follows: in the case $r > r_{ch}$, the surface tension of a nanoparticle can be considered to be equal to its macroscopic value; in the case $r \leq r_{ch}$, it is assumed that the dependence of the surface tension on the system size is described by the linear formula of A.I. Rusanov: $\sigma = Kr$ where K is the proportionality factor which is commonly estimated based on numerical simulations or empirically.

As it is demonstrated in Table 2 of [23], where the estimates of fluctuations for several pure metals are given, the fluctuation values are no more than a fraction of a cent even for a cluster containing 12 atoms. The considered estimates can also be accompanied by the considerations of M.N. Magomedov on the minimum nanoparticle size at which the differences between solid and liquid phases disappear. The geometric

characteristics of the objects studied in this paper correspond to the area where the applicability of the thermodynamical approach leaves no doubt.

3. Simulation results and discussion

The Gibbs function of a two-components phase-separating system with a *core-shell* structure (1-2) has two minima which correspond to two-phase states with different mutual positions of co-existing phases. Below, the state where the *core*-phase is formed with tungsten (while the *shell*-phase is chromium based) is referred as “state 1”. Vice versa, chromium prevails in the *shell*-phase in state 2. In the case the bulk nanoparticles are dealt with, the minima of the Gibbs function corresponding to each state are symmetric and characterized by equal energies while the compositions of co-existing *core*- and *shell*-phases do not depend on the state, which emerges in the nanoparticle. The compositions of *core*- and *shell*-phases in the bulk structures are also independent on particle size and morphology and match the reference data [8]. At the nanoscale, due to the significant increase in the energy contribution of all the interface boundaries in the system, the minima of the Gibbs function shift in comparison with the ones of bulk structures. As a result, the compositions of *core*- and *shell*-phases depend on the mutual arrangement of co-existing phases, being different in states 1 and 2, as well as on the size and morphology of the considered nanoparticles. The free energy of nanoparticles in state 1 is lower than the one of state 2, i.e., state 2 becomes metastable.

The effects demonstrated below result from the tendency of the nanosystem to reduce its free energy: in a *core-shell* structure; such reduction can be realized according to the three mechanisms. The terms introduced in [17] being used, these mechanisms are as follows:

- *volume-controlled segregation*: transferring the matter from the inner phase (*core*-) into the outer one (*shell*-) leading to a decrease in the area of the internal (*core-shell*) interface boundary (this mechanism is hereinafter denoted as “mechanism 1”);
- *surface energy-controlled segregation*: enriching predominantly the outer (*shell*-) phase with the component with the lower surface energy leading to a decrease in the energy of the external interface boundary (the energy contribution of the internal one being much lower practically always; this mechanism is hereinafter denoted as “mechanism 2”);
- *suppression*: maintaining the homogeneous state of the system, the phase-separation process being suppressed. Physically, this mechanism stems from reducing the upper critical dissolution temperature down to the value below the considered one (this mechanism is hereinafter denoted as “mechanism 3”). In the case mechanism 3 being realized, the minimum of the Gibbs function corresponding to the considered heterogeneous state disappears, being replaced by the one corresponding to the homogeneous configuration.

In the considered system, tungsten is characterized by higher values (in comparison with chromium) by higher values of the molar volume and surface energy at the same time. The effective diameter of the nanoparticles simulated below is 40 nm. The nanoparticle composition is equiatomic.

For both states, Fig. 1 illustrates the dependence of the solubility limits of chromium in tungsten on the nanoparticle morphology and temperature. The realization of the considered effects is the most vivid for state 2: the lower the volume of a nanoparticle is and the more complicated the morphology of a nanoparticle is (the lower the fractal dimension is), the higher the solubility of chromium in tungsten. For example, being equal to ~9 at. % (the values for bulk structures are given in Fig. 1 with the solid line without markers) for macroscale particles at $T = 1300$ K, the solubility limit demonstrates a dramatic increase up to ~14 (for $D = 2.90$) and ~15 at. % ($D = 2.80$). At the same time, variations of the fractal dimension of a nanoparticle in state 2 lead to small changes in the solubility of W in Cr. For state 1, the solubility of chromium in tungsten shows a lower sensitiveness to the changes in D (which is accompanied, however, by a significant reduction of the mentioned solubility limit with a decrease in the nanoparticle effective diameter).

Fig. 2, in its turn, demonstrates how the nanoparticle morphology influences on the solubility of W in Cr in state 1. Firstly, the lower the fractal dimension is, the lower the solubility limit of tungsten in chromium turns out to be. Secondly, the relation between the nanoscale solubility limit and the bulk one depends on the fractal dimension of a nanoparticle. In detail, the solubility of tungsten in chromium in nanoparticles is lower than the one in the bulk state in the case of $D < 2.90$. In the case of “regular” nanoparticles ($D = 3.00$), meanwhile, the solubility limit exceeds the bulk value at “high” temperatures near the UCdT.

At lower temperatures, however, the solubility limit is somewhat lower in comparison with the one for macro-sized particles. Taking into account the mechanisms listed above, the demonstrated regularities can be

explained as follows: “complicating” the morphology and decreasing the effective diameter of a nanoparticle in state 2 leads to the predominant implementation of mechanism 2 (“*surface energy-controlled segregation*”); the atomic fraction of Cr in the *shell*-phase grows up.

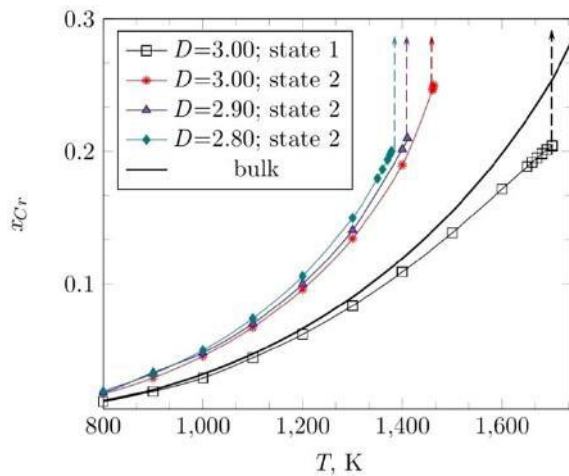


Fig. 1. Temperature - dependent phase equilibria (the chromium solubility in tungsten, atomic fractions) for nanoparticles in different states of the *core-shell* structure for various values of D .

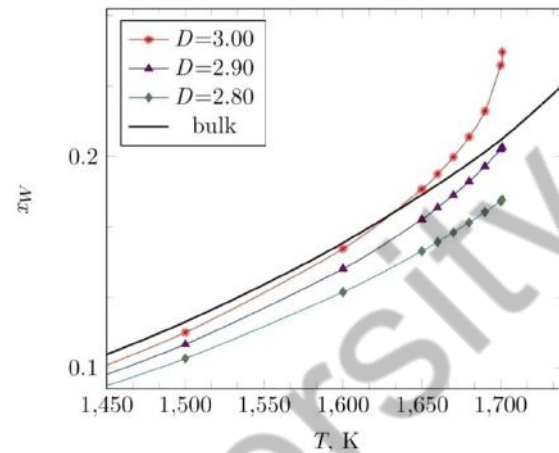


Fig. 2. Temperature-dependent phase equilibria (the tungsten solubility in chromium, atomic fractions) for nanoparticles in state 1 for various values of D .

The same mechanism 2 is characteristic for “regular” ($D = 3.00$) nanoparticles in state 1 at “low” temperatures (a decrease in the atomic fraction of W in the *shell*-phase is observed). At “higher” temperatures, at the same time, mechanism 1 (“*volume-controlled segregation*”) is realized while the tungsten content is increased in the *shell*-phase. If the nanoparticle morphology becomes more complicated (i.e., the fractal dimension of a nanoparticle is reduced) at any temperature in state 1, the realization of mechanism 2 manifests itself (in more detail, the “competition” between the mechanisms of reducing the free energy is discussed in [16, 17, 19]). In the Fig. 1, the vertical dashed lines represent the temperatures at which mechanism 3 (“*suppression*”) is implemented in nanoparticles. At these temperatures, the minimum of the Gibbs function (which corresponds to the heterogeneous state 2) disappears with the appearance of another one in the position of the homogeneous state without the phase separation.

The “*suppression*” temperature for state 1 is higher than the one for state 2 (as demonstrated in Fig. 1): between these temperatures for states 1 and 2, the heterogeneous state 1 and the homogeneous state formed instead of the heterogeneous state 2 are the possible ones in the system. Above the “*suppression*” temperature for state 1, the homogeneous configuration becomes the only possible one. As mentioned above, the “*suppression*” temperatures for nanoparticles can be associated with the nanoscale UCdT values for states 1 and 2; in both cases the UCdT values are much lower in comparison with the bulk values, especially for nanoparticles in state 2: the UCdT reduction with a decrease in the fractal dimension reaches the values of hundreds degrees. The demonstrated results can be accompanied by several other non-trivial effects in small-volume structures, e.g., by the effect of the chemical composition. In bulk structures, a variation of the initial composition of the considered system leads only to changes in the volume fractions of co-existing phases (directly according to the so-called “*lever rule*”) but has no influence on the equilibrium phase composition. In small-volume systems, in their turn, not only the volume fractions but also the compositions of *core*- and *shell*-phases (and co-existing phases in the most general case) at equilibrium depend on the initial composition. This effect is generic for nanoscale structures, being explained by the realization of different mechanisms of lowering the free energy of the system in the case of nanoparticles of different compositions (see [17, 19] for more details).

In real-life fabrication processes, the nanoparticle ensembles are dealt with instead of individual nanoparticles, being characterized by the size and shape distributions. As shown by us in [26, 28], the equilibrium size distributions for a free-dispersed system formed by nanoparticles with fractal dimension D can be expressed as follows:

$$f_D(\phi_p, D, N) \sim \exp\left(-\frac{\gamma A_{sp}(D) + RT \ln f_p}{RT}\right), \quad f_p = \frac{N}{N - \phi_p} \exp\left\{\pi\left(\sqrt{\frac{2}{3}}(N - \phi_p) - \sqrt{\frac{2}{3}}N\right)\right\}.$$

Here, $\phi_p = \omega(d_{eff}/d_{at})^3$ is the so-called “stoichiometric number” of a nanoparticle (the number of atoms in a nanoparticle), $A_{sp}(D)$ is the specific surface area of the nanoparticle ensemble, γ is the surface energy of the material in the considered external environment (see also some remarks in Ref. [20]); ω is the lattice packing density, N is the total number of atoms in the system, d_{at} is the atomic diameter.

The suggested calculation technique provides the results which are in perfect accordance with the experimentally observed distributions (see [26] and Refs. therein). The estimates can be obtained which make it possible to model the thermodynamical conditions for the realization of optimal average geometric characteristics of nanoparticles leading to the optimal phase composition as well to predict the degree at which the equilibrium phase compositions and the set of composition-dependent functional properties are “blurred” in an ensemble. For example, average fractal dimension $\langle D \rangle$, average stoichiometric number $\langle \phi_p \rangle$ and average effective diameter d_{eff} of nanoparticles in the ensemble can be calculated as follows [28]:

$$\langle D \rangle = \frac{\sum_i D_i \int f_D(D_i, \phi_p, N) d\phi_p}{\Omega(N)}, \quad \langle \phi_p \rangle = \frac{\sum_i \int \phi_p f_D(D_i, \phi_p, N) d\phi_p}{\Omega(N)},$$

$$\langle d_{eff} \rangle = \Omega(N)^{-1} d_{at} \sum_i \int f_D(D_i, \phi_p) d\phi_p, \quad \Omega(N) = \sum_i \int f_D(D_i, \phi_p, N) d\phi_p.$$

Here, the limits of the integration over ϕ_p belong to range $[1, N]$ while the sample of distributions is considered where $D_i \in (2, 3)$ with an arbitrarily selected step [26, 28].

The fractal dimension of nanoparticles can be estimated based on the optical or electron microscopy data using various methods including the so-called “box-counting technique” [29]. In the framework of the mentioned approach, the image of the considered nanoparticle ensemble is converted into a monochrome one which is then divided into square equal-area cells. In order to calculate the fractal dimension, the image divided into cells is transformed into a square matrix. If the brightness of a cell exceeds the preliminarily selected brightness threshold value (B_{th}), such a cell corresponds to the matrix cell with the value of 1. Otherwise, an image cell is represented by a matrix cell with the value of 0. Based on this transformation, fractal dimension D is calculated using the following expression: $S = AL^D$ where S is the number of matrix cells with the value of 1; L is the matrix rank; A is the factor which matches dimensions. The dependence is obtained using the least squares method: the matrix rank being sequentially decreased (the cell size being increased) by 2, 4, 8, ... times provided that the value of 1 is assigned to the cells which contain at least one pixel of the initial image, the brightness of which exceeds the selected threshold value.

In the general case, the calculated fractal dimension is sensitive to the value of B_{th} , being varied in a wide range when changing B_{th} . For selecting the correct value of B_{th} , the “calibration” dependence ($D(B_{th})$) is constructed. The sensitivity of the fractal dimension to the brightness threshold is represented by the inclination angle of curve $D(B_{th})$. An example of such “calibration” dependences is demonstrated in [30].

In the formal consideration, the random uniformly distributed white noise is characterized by its fractal dimension as well as by the relation between D and the brightness threshold in the form of a smooth monotonously decreasing function as follows:

$$D(B_{th}) = 2 + \frac{\ln\left(1 - \frac{B_{th}}{B_{th}^{max}}\right) - \ln A}{\ln L}, \quad S = L^2 \left(\frac{B_{th}^{max} - B_{th}}{B_{th}^{max}}\right) = AL^D.$$

In the case of a square image, $A = 1$. However, the dependence of D on matrix rank L does not allow considering the random noise as an appropriate fractal object for the application of the box-counting techniques. The monochrome images of the classical fractal objects (Koch snowflakes, Sierpinski carpets, fractal trees etc) are characterized by $D = \text{const}$, $A = \text{const}$ for any B_{th} . For real images which represent

superpositions of fractal structure and noise, dependence $D(B_m)$ contains straight sections, steps as well as extrema and inflection points. The correct brightness threshold value corresponds to the straight section within which the deviation of dependence $\ln S = D \ln L + \ln A$ from a straight line is minimal. This section is found based on the minimum value of the first derivation of dependence $D(B_m)$. The absence of a well-pronounced straight section can result from the heterogeneity of optical properties of nanoparticles or to the insufficient image quality.

4. Conclusion

The performed thermodynamical analysis of how the phase equilibria in nanoscale particles of phase-separating solid solutions depend on the particle morphology using the example of W-Cr heavy pseudo alloy leads to the following conclusions.

1. A nanoparticle with a *core-shell* structure has two possible two-phase states which correspond to different mutual arrangements of co-existing tungsten-based and chromium-based phases. Unlike systems in the bulk state where both phases have equal free energies and compositions of *core*- and *shell*-phases, in nanoscale particles, the phase compositions are considerably different in each state.

2. The temperature range in which the heterogeneous state is stable significantly shrinks with reducing the volume of a nanoparticle and “complicating” its morphology. The upper critical dissolution temperatures for each state of the *core-shell* structure are also different, being both reduced with a decrease in the particle size and fractal dimension.

3. The equilibrium phase composition of nanoparticles in each state depends on the particle morphology while the pattern itself of the dependences of mutual solubilities significantly differs for particles of various shapes in different states. This fact is associated with the occurrence of three different mechanisms (“volume-controlled segregation”, “surface energy-controlled segregation” and “suppression”) which can manifest themselves at the same time and even be “competing”.

The obtained regularities also demonstrate an additional “knob” which makes it possible to tune multiple composition-dependent functional properties of nanostructured materials (including electrical and thermal conductivity, resistivity to corrosion, elastic properties etc) through the taking into account the specific influence of morphology factors on the phase composition at the nanoscale. Such considerations could also be accompanied either with the up-to-date techniques of the controllable synthesis of nanoparticles with a given shape or with the methods of describing and predicting various properties of nanoparticle ensembles. In the latter case, our considerations can be helpful in predicting the range possible variations of nanoparticle phase compositions as well as the degree at which the corresponding functional properties are “blurred” in an ensemble.

Acknowledgments

The authors cordially thank Thesis Council 24.2.340.04 (N.I. Lobachevsky Nizhny Novgorod State University) for valuable discussions during the thesis defense on May 18, 2023.

The authors also thank two anonymous reviewers for the attention to the study and valuable remarks.

REFERENCES

- 1 Vilémová M., Illková K., Lukáš F., et al. Microstructure and phase stability of W-Cr alloy prepared by spark plasma sintering. *Fus. eng. des.*, 2018, Vol. 127, pp. 173 – 178. doi:10.1016/j.fusengdes.2018.01.012.
- 2 Hou Q.-Q., Huang K., Luo L.-M., Tan X.-Y., et al. Microstructure and its high temperature oxidation behavior in W-Cr alloys prepared by spark plasma sintering. *Materialia*, 2019, Vol. 6, p.100332. doi:10.1016/j.mta.2019.100332.
- 3 Bose A., Schuh C.A., Tobia J.C., et al. Traditional and additive manufacturing of a new tungsten heavy alloy alternative. *Int. j. refract. met. hard mater.*, 2018. Vol. 73, pp. 22 – 28. doi:10.1016/j.ijrmhm.2018.01.019.
- 4 Tilmann W., Fehr A., Heringhaus M. Mechanical milling to foster the solid solution formation and densification in Cr-W-Si for hot-pressing of PVD target materials. *Adv. powder technol.*, 2021, Vol.32, No.6, pp. 1927 – 1934. doi:10.1016/j.appt.2021.04.001.
- 5 Olakanmi E.O., Cochrane R.F., Dalgarno K.W. A review of selective laser sintering/melting (SLS/SLM) of aluminium alloy powders: Processing, microstructure, and properties. *Prog. mater. sci.*, 2015. Vol. 74, pp. 401 – 477. doi:10.1016/j.pmatsci.2015.03.002.
- 6 Cordero Z.C., Carpenter R.R., Schuh C.A., et al. Sub-scale ballistic testing of an ultrafine grained tungsten alloy into concrete targets. *Int. j. impact eng.*, 2016, Vol. 91, pp. 1 – 5. doi:10.1016/j.ijimpeng.2015.11.013.

- 7 Chookajorn T., Park M., Schuh C.A. Duplex nanocrystalline alloys: entropic nanostructure stabilization and a case study on W-Cr. *J. mater. res.*, 2015., Vol. 30, No. 2, pp. 151 – 162. doi:10.1557/jmr.2014.385.
- 8 Udovskii A.L., Karpushkin V.N., Nikishina E.A. A method for autonomous thermodynamic assessment of phase diagrams of binary systems containing p disordered phases of variable composition and q phases of constant composition at $(p, q) \leq 10$. *Metally*, 1991. No. 4, pp. 87 – 103 [in Russian].
- 9 Shishulin A.V., Shishulina A.V. Equilibrium phase composition and mutual solubilities in fractal nanoparticles of the W-Cr heavy pseudo-alloys. *Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials*, 2019, No. 11. pp. 380 – 388. doi:10.26456/pcascnn/2019.11.380.
- 10 Bajaj S., Haverty M.G., Arróyave R., Goddard W.A., Shankar S. Phase stability in nanoscale material systems: extensions from bulk phase diagrams. *Nanoscale*, 2015, Vol. 7, No. 9868. doi:10.1039/C5NR01535A.
- 11 Shirinyan A., Wilde G., Bilgorodskyy Y. Melting loops in the phase diagram of individual nanoscale alloy particles: completely miscible Cu-Ni alloys as a model system. *J. mater. sci.*, 2020. Vol. 55, pp. 12385 – 12402. doi:10.1007/s10853-020-04812-2.
- 12 Mendoza-Pérez R., Muhl S. Phase diagrams of refractory bimetallic nanoalloys. *J. nanopart. res.*, 2020, Vol. 22, No. 36. doi:10.1007/s11051-020-05035-x.
- 13 Geoffrion L.-D., Guisbiers G. Chemical ordering in $\text{Bi}_{1-x}\text{-Sb}_x$ nanostructures: Alloy, janus or core-shell? *J. phys. chem., C*. 2020, Vol.124, No.25, pp. 14061 – 14068. doi:10.1021/acs.jpcc.0c04356.
- 14 Geoffrion L.D., Guisbiers G. Physico-chemical properties of selenium–tellurium alloys across the scales. *Nanoscale Adv.*, 2021. Vol.3, No.14, pp. 4254 – 4270. doi:10.1039/D1NA00087J.
- 15 Shishulin A.V., Fedoseev V.B. Effect of initial composition on the liquid–solid phase transition in Cr-W alloy nanoparticles. *Inorg. mater.*, 2019. Vol.55, No.1, pp. 14 – 18. doi:10.1134/S0002337X19010135.
- 16 Ghasemi M., Zanolli Z., Stankovski M., Johansson J. Size- and shape-dependent phase diagram of In-Sb nanoalloys. *Nanoscale*, 2015, Vol. 7, pp. 17387 – 17396. doi:10.1007/s10891-020-02182-9.
- 17 Shishulin A.V., Potapov A.A., Shishulina A.V. The initial composition as an additional parameter determining the melting behavior of nanoparticles (a case study on $\text{Si}_x\text{-Ge}_{1-x}$ alloys). *Eurasian phys. tech. j.*, 2021, Vol. 18, No.4, pp. 5 – 13. doi:10.31489/2021NO4/5-14.
- 18 Guisbiers G., Khanal S., Ruiz-Zapeda F., Roque de la Puente J., Yakaman M.-J. Cu-Ni nanoalloy: mixed, core-shell or janus nanoparticles? *Nanoscale*, 2014, Vol. 6, pp. 14630–14635. doi:10.1039/C4NR05739B.
- 19 Shishulin A.V., Shishulina A.V. One more parameter determining the stratification of solutions in small-volume droplets. *J. eng. phys. Thermophys*, 2022, Vol. 95, No. 6, pp. 1374 – 1382. doi:10.1007/s10891-022-02606-8.
- 20 Shishulin A.V., Fedoseev V.B., Shishulina A.V. Environment-dependent phase equilibria in a small-volume system in the case of the decomposition of Bi-Sb solid solutions. *Butlerov commun.*, 2017. Vol. 51, No. 7, pp. 31 – 37 [in Russian].
- 21 Guisbiers G. Advances in thermodynamic modeling of nanoparticles. *Adv. phys. X.*, 2019, Vol. 4, No.1, 1668299. doi:10.1080/23746149.2019.1668299
- 22 Magomedov M.N. On the statistical thermodynamics of a free-standing nanocrystal: silicon. *Cryst. rep.*, 2017, Vol. 63, No. 3, 480 – 496. doi:10.1134/S1063774517030142.
- 23 Samsonov V.M., Demenkov D.E., Karcharov V.I., Bembel A.G. Fluctuation approach to the problem of thermodynamics applicability to nanoparticles. *Bull. Russ. acad. sci.: phys.*, 2011. Vol. 75, No. 8, pp. 1073 – 1077. doi:10.3103/S106287381108034X.
- 24 Straumal B.B., Mazilkin A.A., Straumal P.B., Gusak A.M., Baretzky B. Shift of lines in phase diagrams for nanograined materials. *Adv. struct. mater.*, 2013. Vol. 4, pp. 265 – 285. doi:10.1007/8611_2010_29.
- 25 Radnóczy G., Bokányi E., Erdélyi Z., Misják F. Size-dependent spinodal decomposition in Cu–Ag nanoparticles. *Acta mater.*, 2017. Vol. 123., pp. 82– 89. doi:10.1016/j.actamat.2016.10.036
- 26 Fedoseev V.B., Shishulin A.V. On the size distribution of dispersed fractal particles. *Tech. phys.*, 2021. Vol. 66, No. 1, pp. 34 – 40. doi:10.1134/S1063784221010072
- 27 Shishulin A.V., Potapov A.A., Shishulina A.V. On the transition between ferromagnetic and paramagnetic states in mesoporous materials with fractal morphology. *Eurasian phys. tech. j.*, 2021, Vol. 18, No.2, pp. 6 – 11. doi:10.31489/2021NO2/6-11.
- 28 Shishulin A.V., Potapov A.A., Shishulina A.V. Several notes on the lattice thermal conductivity of fractal-shaped nanoparticles. *Eurasian phys. tech. j.*, 2022, Vol. 19, No.3, pp. 10 – 17. doi:10.31489/2022NO3/10-17.
- 29 Li J., Du Q., Sun C. An improved box-counting method for image fractal dimension estimation. *Pattern recognit*, 2009. Vol. 42, pp. 2460 – 2469. doi:10.1016/j.patcog.2009.03.001.
- 30 Fedoseeva E.N., Fedoseev V.B. Interaction of chitosan with benzoic acid in solution and films. *Polymer sci. Ser. A.*, 2011. Vol. 53, No. 11, pp. 1040 – 1046. doi:10.1134/S0965545X1110004X.

SUMMARIES	ТҮСІНІКТЕМЕЛЕР	АННОТАЦИИ
<p>Tareq M.H., Lafta Sadeq H., Hussain Wafaa A. Төмен мольдік қатынаста Cs_yCo_{1-0.5y}Fe₂O₄ нанобөлшектерінің магниттік қасиеттерін зерттеу Магниттік қасиеттерді басқару үшін бұрын пайдаланылмаған элементтермен ферритті алмастыру әсері зерттеушілер үшін үлкен қызығушылық тудырады. Бұл зерттеуде Cs_yCo_{1-0.5y}Fe₂O₄ нанобөлшектерінің құрылымдық және магниттік қасиеттеріне у молярлық қатынасы 0,0, 0,05, 0,15 және 0,25 болғандағы Cs-дің төмен алмастыруының әсері көрсетілген. Синтез әдісі ретінде тұндыру әдісі таңдалды. Металл хлоридтері рН 10-ға жету мақсатында NaOH көмегімен тазартылған суда реакция жүргізу үшін пайдаланылды. Барлық үлгілер үшін рентгендік дифракция, өрістік эмиссиялық сканерлеуші электронды микроскопиясы, электронды дисперсиялық рентгенография және діріл үлгілерінің магнитометриясы жүргізілді. Барлық үлгілерде шпинельдік құрылым негізінен Со ферритінің құрылымымен сәйкес келеді. Cs мөлшерінің артуымен тордың тұрақтысының жалпы артуы байқалды, бұл кезде мольдік қатынас 0-ден 0,25-ке дейін өскенде кристаллит өлшемдері шамамен 18-ден 12,2 нм-ге дейін азайды. Электронды-микроскопиялық зерттеу барлық үлгілерде басқа пішіндерсіз сфералық нанобөлшектер бар екенін көрсетті. Cs1+ мөлшері артқан кезде бөлшектердің орташа өлшемі 40-тан 60 нм-ге дейін болды. Магниттік параметрлер негізінен салыстырмалы түрде жоғары коэрцитивті күшті (кең ілмектер) және магниттелу қанықтылығының (50,43 мкГ/г дейін), кристалды анизотропты тұрақтылық пен квадраттық коэффициенттің төмендеуін көрсетті. Кілт сөздері: цезий-кобальт ферриті, құрылымдық қасиеттері, гистерезис ілмегі, нанобөлшектер, магниттеу.</p>	<p>Tareq M.H., Lafta Sadeq H., Hussain Wafaa A. Исследование магнитных свойств наночастиц Cs_yCo_{1-0.5y}Fe₂O₄ при низком молярном соотношении Эффект замещения феррита ранее не использовавшимися элементами для управления магнитными свойствами представляет большой интерес для исследователей. Данное исследование иллюстрирует влияние низкого замещения Cs с молярными соотношениями у, равных 0,0, 0,05, 0,15 и 0,25, на структурные и магнитные свойства наночастиц Cs_yCo_{1-0.5y}Fe₂O₄. Метод синтеза являлся методом осаждения. Хлориды металлов использовались для проведения реакции в дистиллированной воде с использованием NaOH для достижения рН 10. Для всех образцов были проведены рентгеновская дифракция, полевая эмиссионная сканирующая электронная микроскопия, электронно-дисперсионная рентгенография и магнитометрия вибрирующих образцов. У всех образцов шпинельная структура в значительной степени совпадает с структурой феррита Со. Наблюдалось общее увеличение постоянной решетки с ростом содержания Cs, в то время как размер кристаллитов уменьшался примерно с 18-ти до 12,2 нм при увеличении молярного соотношения от 0 до 0,25. Электронно-микроскопическое исследование показало, что все образцы имеют сферические наночастицы без каких-либо других форм. Средний размер частиц составлял от 40 до 60 нм при увеличении содержания Cs1+. Магнитные параметры в основном показали относительно высокую коэрцитивную силу (широкие петли) и снижение насыщенности намагниченности (до 50,43 мкГ/г), кристаллической анизотропной постоянной и коэффициента квадратичности. Ключевые слова: цезий-кобальтовый феррит, структурные свойства, петля гистерезиса, наночастицы, намагничивание.</p>	<p>Soldatxan D., Amangeldi N., Makhonov K.M., Смагулов Ж.К., Әнуар А., Мәуей Б. Үдетілген ⁶Li - литий және ¹⁶O – оттегі ядролардың ¹²C – көміртегі ядросынан шашырауын жартылай микроскопиялық талдауда жана ВЗУ-Fetal потенциалын қолдану Төмен энергияда үдетілген ⁶Li - литий, ¹⁶O – оттегі иондарының ¹²C -көміртегі ядродан шашырауының бұрыштық таралуынан табылған феноменологиялық және жартылай микроскопиялық потенциалдар мәндері анықталған. Серпімді шашыраудың эксперименттік деректеріне оптикалық модель және екілік фолдинг модель шеңберінде талдау жасалған. Фолдинг модель негізінде тиімді нуклон-нуклондық өзара әсерлесудің тығыздыққа тәуелді Юкаваның 3 терминді Fetal потенциалы алғаш рет қолданылған. Оптикалық потенциалдың нақты бөлігі ретінде Юкаваның 3 терминді Fetal, Reid, Paris потенциалдарының тығыздыққа тәуелді микрофолдинг түрлері екілік фолдинг модельде құрылды. ¹⁶O+¹²C ядролық жүйе үшін зертханалық 28 MeV және 30 MeV энергияларда жаңа Fetal микропотенциалының тиімділігі Reid, Paris нұсқаларымен салыстырылмалы түрде зерттелген. ⁶Li+¹²C ядролық жүйесі үшін зертханалық 12,3 MeV және 20 MeV энергияларда жаңа Fetal күй теңдеуінің тиімділігі Reid, Paris нұсқаларымен салыстырылмалы түрде зерттелген. Феноменологиялық талдаудың нәтижесінде эксперименттік және теориялық кималардың салыстырмалы кателіктері 1,1 – 3,0 аралықта анықталды. Жартылай микроскопиялық талдаудың нәтижесінде микрофолдинг потенциалдардың қайта нормалау коэффициенттері 0,8 - 1,0 аралығында анықталды. Алынған мәліметтері әртүрлі іргелі зерттеулерде, атап айтқанда болашақтағы термоядролық қондырғыларда және ядролық астрофизикада қолданылатын болады. Кілт сөздері: ядролық материя, серпімді шашырау, жартылай микроскопиялық талдау, ВЗУ- Fetal потенциалы.</p>

Солдатхан Д., Амангелді Н., Маханов К.М., Смагулов Ж.К., Ануар А., Мауей Б.

Использование нового потенциала ВЗУ-Fetal при полумикроскопическом анализе рассеяния ускоренных ядер ${}^6\text{Li}$ - лития и ${}^{16}\text{O}$ - кислорода от ядра ${}^{12}\text{C}$ – углерода

Определены феноменологические и полумикроскопические значения потенциалов, обнаруженные в угловом распределении рассеяния ${}^6\text{Li}$ - лития, ${}^{16}\text{O}$ – ионов кислорода от ядра ${}^{12}\text{C}$ - углерода, ускоренного при низких энергиях. Экспериментальные данные упругого рассеяния были проанализированы в рамках оптической модели и двойной модели фолдинга. На основе модели фолдинга впервые был использован потенциал Fetal, созданный в 3-терминах Юкавы, зависимой от плотности эффективного нуклонно-нуклонного взаимодействия. Зависимые от плотности типы микрофолдинга потенциалов Fetal, Reid, Paris, сформированные из 3-терминов Юкавы как реальная часть оптического потенциала были созданы в модели двойного фолдинга. Для ядерной системы ${}^{16}\text{O}+{}^{12}\text{C}$ эффективность нового микропотенциала Fetal при лабораторных энергиях 28 МэВ и 30 МэВ изучена сопоставимо с вариантами Reid, Paris. Эффективность нового уравнения состояния Fetal при лабораторных энергиях 12,3 МэВ и 20 МэВ для ядерной системы ${}^6\text{Li}+{}^{12}\text{C}$ изучалась сопоставимо с вариантами Reid, Paris. В результате феноменологического анализа были выявлены относительные погрешности экспериментального и теоретического сечений в интервале 1,1 - 3,0. В результате полумикроскопического анализа микрофолдинг определяли коэффициенты переформулирования потенциалов в пределах 0,8 - 1,0. Полученные данные будут использованы в различных фундаментальных исследованиях, в частности в будущих термоядерных установках и ядерной астрофизике.

Ключевые слова: ядерная материя, упругое рассеяние, полумикроскопический анализ, потенциал ВЗУ-Fetal.

Нуритдинов И., Таиметов М. Ю., Ходжаев У. О., Омаров С. Х., Халлоков Ф. К.

Электронды сәулеленудің темір қосылған таллий мен индий моноселинидінің үштік кристалдарының кристалдық құрылымына, беттің микрорельефіне және зондталған еніне әсері.

Берілген жұмыс электронды сәулеленудің темірмен легирленген таллий мен индий моноселинидтерінің үштік кристалдарының моно - және поликристалдарының құрылымына, беттік морфологиясына және тыйым салынған аймағына әсері зерттелген. Синтезделген поликристалды үлгілер, сондай-ақ өсірілген таллий және индий моноселинидті монокристалдар бір фазалы екендігі анықталды. Кристалдар келесі тор параметрлеріне ие болатын тетрагональды (кеңістіктік топ I4/мкм) элементар ұяшығы бар: $a \sim b = 8,12 \text{ \AA}$, $c = 6,88 \text{ \AA}$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. Энергиясы 2 МэВ және сәулелік ток тығыздығы $0,085 \text{ мкА/см}^2$ электрондармен сәулелендіру электрондардың флюенсіне байланысты кристалдардың құрылымы мен қасиеттерінің күрделі түрде өзгеруіне әкеледі. Сонымен бірге кристалдық тор параметрлерінің өзгеруіне, профильдің орташа арифметикалық ауытқуының максималды мәнінің жоғарылауына, сондай-ақ сәулелендірілген кристалдар бетінің орташа кедір-бұдырлығының биіктігінің төмендеуіне әкеледі. Ұнтақ үлгісін энергия тығыздығы $5 \times 10^{16} \text{ эл/см}^2$ электрондармен сәулелендіру нанокристаллит өлшемінің 32.50 нм-ден 43.33 нм-ге дейін арттыруына ықпалын тигізеді.

Кілт сөздер: монокристалл, кристалдық құрылым, элементар ұяшық, кеңістіктік топ, электронды сәулелену, флюенс, кристаллит өлшемі, кедір-бұдырлылық.

Нуритдинов И., Таиметов М.Ю., Ходжаев У.О., Умаров С.Х., Халлоков Ф.К.

Влияние электронного облучения на кристаллическую структуру, микрорельеф поверхности и зондированную ширину тройных кристаллов допированного железом таллия и моноселинида индия.

В данной работе исследовано влияние электронного облучения на структуру, морфологию поверхности и запрещенную зону моно- и поликристаллов легированных железом тройных кристаллов моноселинидов таллия и индия. Установлено, что синтезированные поликристаллические образцы, а также выращенные монокристаллы моноселинидов таллия и индия являются однофазными. Кристаллы имеют тетрагональную элементарную ячейку (пр. гр. I4/мкм) со следующими параметрами решетки: $a \sim b = 8,12 \text{ \AA}$, $c = 6,88 \text{ \AA}$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. Облучение электронами с энергией 2 МэВ и плотностью тока пучка $0,085 \text{ мкА/см}^2$ приводит к изменениям структуры и свойств кристаллов сложным образом в зависимости от флюенса электронов. Также приводит к изменению параметров кристаллической решетки, увеличению максимального значения среднеарифметического отклонения профиля, а также уменьшению высоты средней шероховатости поверхности облученных кристаллов. Облучение порошкового образца электронами с плотностью энергии $5 \times 10^{16} \text{ эл/см}^2$ способствует увеличению размера нанокристаллитов с 32.50 нм до 43.33 нм.

Ключевые слова: монокристалл, кристаллическая структура, элементарная ячейка, пространственная группа, электронное облучение, флюенс, размер кристаллитов, шероховатость.

Копбалина Қ.Б., Махмұтова А.С., Турдыбеков Д.М., Турдыбеков К.М., Төлєнова Г.Қ.

Лупинин алкалоиды молекуласының құрылымы мен қасиеттерін кванттық - химиялық зерттеу.

Мақалада 1-((4-(3-метоксифенил)-1Н-1,2,3-триазол-1-ил)метил)октагидро-1Н-хинолизин молекуласын кванттық-химиялық зерттеу нәтижелері келтірілген. Кванттық-химиялық есептеулер нәтижесінде алынған берілген молекуланың геометриялық сипаттамалары талданып, рентгенді құрылымдық талдаудың эксперименттік мәліметтерімен салыстырылған. С11-N12 және С7-С11 лабильді байланыстарын бұру арқылы жүргізілген конформациялық талдау нәтижелері бойынша молекуланың ең тиімді конформациялық күйлері анықталған. Шекаралық молекулалық орбитальдердің локализациясы С11 атомы маңындағы 1-этил-4-(4-метоксифенил)-1Н-1,2,3-триазол алмастырғышында болатындығы көрсетілген, ал бұл оның жаңа биологиялық белсенді заттарды іздеу үшін жүргізілетін кейінгі модификация реакцияларына қатысуын болжайды.

Кілт сөздері: кванттық - химиялық есептеулер, хинолизин туындылары, конформациялық талдау, лупинин туындылары, рентгендік құрылымдық талдау.

Копбалина Қ.Б., Махмұтова А.С., Турдыбеков Д.М., Турдыбеков К.М., Төлєнова Г.Қ.

Квантово-химическое исследование структуры и свойств молекулы производного алкалоида лупинина.

В статье представлены результаты квантово-химического изучения молекулы 1-((4-(3-метоксифенил)-1Н-1,2,3-триазол-1-ил)метил)октагидро-1Н-хинолизина. Геометрические характеристики данной молекулы, полученные в результате квантово-химических расчетов, проанализированы и сопоставлены экспериментальным данным рентгеноструктурного анализа. По результатам конформационного анализа, осуществленного путем вращения вдоль лабильных связей С11-N12 и С7-С11 установлены наиболее выгодные конформационные состояния молекулы. Показано, что локализация граничных молекулярных орбиталей приходится на 1-этил-4-(4-метоксифенил)-1Н-1,2,3-триазоловый заместитель при атоме С11, что предполагает его участие в последующих реакциях модификации, проводимых для поиска новых биологически активных веществ.

Ключевые слова: квантово-химические расчеты, производные хинолизина, конформационный анализ, производные лупинина, рентгеноструктурный анализ.

Каюмова А.С., Сериков Т.М., Омарова Г.С., Джакупова М.С.

Күміс нанобөлшектерінің концентрациясының титан қостотығының нанозекшелерінің фотокаталикалық белсенділігіне әсері

Бұл жұмыста титан диоксидінің (ТNR) нанозекшелеріндегі күміс нанобөлшектерінің концентрациясының олардың фотокаталикалық белсенділігіне әсерін зерттеу нәтижелері келтірілген. Рутил құрылымы бар ТNR гидротермиялық синтез әдісімен алынды. Өтпелі металл күміс тұзының (AgNO₃) зат мөлшерімен өзгеріп, ТNR бетіндегі химиялық тотықсыздану арқылы әртүрлі концентрациядағы Ag нанобөлшектері алынды. Беттік морфология мен ЭДА зерттеулері Ag нанобөлшектерінің біркелкі таралғанын және ТNR бетіне бекітілгенін көрсетті. Үлгілердің фотокаталикалық белсенділігі пленка бетінің бірлігінен алынған фототок мөлшері және ксенон шамының жарық көзімен бетті жарықтандыру кезінде метилен көк бояғыштың фотодеградациясы бойынша бағаланды.

Кілт сөздері: нанозекшелер, титан қостотығы, күміс нанобөлшектері, Ag, фотокатализ.

Каюмова А.С., Сериков Т.М., Омарова Г.С., Джакупова М.С.

Влияние концентрации наночастиц серебра на фотокаталитическую активность наностержней диоксида титана

В данной работе представлены результаты исследования влияния концентрации наночастиц серебра в пленках из наностержней диоксида титана (ТNR) на их фотокаталитическую активность. ТNR со структурой рутила были получены методом гидротермального синтеза. Варируя количеством вещества соли переходного металла серебра (AgNO₃), химическим восстановлением на поверхности ТNR были получены наночастицы Ag с различной концентрацией. Исследования морфологий поверхности и ЭДА показали, что наночастицы Ag равномерно распределены и закреплены на поверхности ТNR. Фотокаталитическая активность образцов оценивалась по величине генерируемого фототока с единицы поверхности пленок и фотодеградации красителя метиленовой голубой при освещении поверхности источником света ксеноновой лампы.

Ключевые слова: наностержни, диоксид титана, наночастицы серебра, Ag, фотокатализ.

Безродный М.К., Майстренко О.О.

Регенерацияны қолдануымен ауаны құрғатудың жылу сорғы-адсорбциялық жүйесін термодинамикалық талдау.

Берілген жұмыста жылу рекуператорын қолдануымен жылу сорғыш және адсорбциялық роторды қамтитын жүйенің әзірлеуі ұсынылған. Зерттеу аясында бұл жүйенің теориялық моделі жасалды, сонымен бірге оның жұмысын сандық талдау үшін математикалық модель құрылды. Термодинамикалық тиімділікке сандық талдау

жүргізілді, жүйенің негізгі түйіндеріндегі ауа параметрлерінің өзгеруі зерттелді, температура мен қоршаған ауаның салыстырмалы ылғалдылығы мен регенерация ауа температурасының жүйенің жұмысына әсері талданған. Сондай-ақ, жылу сорғының конденсаторынан кейін сыртқы ауа параметрлері мен регенерация ауа температурасының өзгерістері кезінде жүйенің тиімділігінің графикалық тәуелділіктері алынған. Рекуператордың ПЭК-нің жүйенің жалпы энергия тиімділігіне әсері зерттелген. Алынған нәтижелер берілген интеграцияланған жүйесін пайдалану жұмыс ауасын құрғату үшін қажетті электр энергиясының меншікті шығынын едәуір төмендететінін және сыртқы ауа параметрлеріне тәуелсіз рекуператорсыз немесе рекуператорсыз және жылу сорғысыз жүйелерден асып түсетінін көрсетеді.

Кілт сөздері: металл жабдықты коррозиядан қорғау, энергетикалық жабдықты сақтау, ауаны кептіру, адсорбциялық кептіргіш, жылу сорғысы, жылуды қалпына келтіру.

Безродный М.К., Майстренко О.О.

Термодинамический анализ теплонасосно-адсорбционной системы осушения воздуха с использованием рекуперации

В данной работе представлена разработка системы, включающей в себя тепловой насос, адсорбционный ротор, с применением рекуператора тепла. В рамках данного исследования была разработана теоретическая модель данной системы, а также создана математическая модель для численного анализа ее работы. Был проведен численный анализ термодинамической эффективности, изучено изменение параметров воздуха в ключевых узлах системы и проанализировано воздействие изменений температуры и относительной влажности окружающего воздуха и температуры воздуха регенерации на работу системы. Также получены графические зависимости эффективности системы при варьировании параметров наружного воздуха и температуры воздуха регенерации после конденсатора теплового насоса. Было проведено исследование влияния КПД рекуператора на общую энергоэффективность системы. Полученные результаты свидетельствуют о том, что использование данной интегрированной системы значительно снижает удельный расход электроэнергии, необходимой для осушения рабочего воздуха, и превосходит системы без рекуператора или без рекуператора и теплового насоса, независимо от параметров наружного воздуха.

Ключевые слова: защита металлического оборудования от коррозии, консервация энергетического оборудования, осушка воздуха, адсорбционная осушитель, тепловой насос, рекуперация тепла.

Медетбеков Б.С., Вурим А.Д., Прозорова И.В., Попов Ю.А.

ИВГ.1М зерттеу реакторының жоғары және төмен байытылған отынынан бөліну өнімдерінің шығымы.

ИВГ.1М реакторында төмен байытылған отыны бар су салқындатылатын технологиялық арналарға сынақтар жүргізу кезінде төмен байытылған және жоғары байытылған отыны бар технологиялық арналардың жылу тасымалдағышындағы бөлу өнімдері мен активтендіру өнімдерінің құрамын салыстырмалы өлшеу жүргізілді. Сыналатын төмен байытылған отын су салқындатқыш арналарының және жоғары байытылған отын арналарының отыннан бөліну өнімдерінің шығуын сипаттайтын сандық мәндерді салыстыруға болатындығы көрсетілді. ИВГ.1М реакторының салқындатқышында кездесетін радионуклидтердің жалпы тізбесінен, жақсы анықталатын радионуклидтер-талдағыштар таңдалды, олардың құрамын салқындатқышта анықтау жылу тасымалдағышқа бөліну өнімдерінің шығу параметрлері бойынша твэл қабықтарының герметикалығын өкілді бақылаудың жеткілікті әдісі ретінде ұсынылуы мүмкін.

Кілт сөздері: жылу тасымалдағыш, твэл, твэл қабықшасы, бөліну өнімі, бөліну өнімдерінің салыстырмалы шығымы, гамма-спектрометрия.

Медетбеков Б.С., Вурим А.Д., Прозорова И.В., Попов Ю.А.

Выход продуктов деления из высоко и низкообогащенного топлива исследовательского реактора ивг.1м

При проведении испытаний водоохлаждаемых технологических каналов с низкообогащенным топливом в реакторе ИВГ.1М выполнены сравнительные измерения содержания продуктов деления и продуктов активации в теплоносителе технологических каналов с низкообогащенным и высокообогащенным топливом.

Показано, что количественные значения, характеризующие выход продуктов деления из топлива тестируемых водоохлаждаемых каналов с низкообогащенным топливом и из каналов с высокообогащенным топливом, сопоставимы. Из общего перечня радионуклидов, обнаруживаемых в теплоносителе реактора ИВГ.1М, выбраны хорошо идентифицируемые радионуклиды-аналиты, определение содержания которых в теплоносителе может быть рекомендовано в качестве достаточного способа представительного контроля герметичности оболочек твэлов по параметрам выхода продуктов деления в теплоноситель.

Ключевые слова: теплоноситель, твэл, оболочка твэла, продукты деления, относительный выход продуктов деления, гамма-спектрометрия.

Цыганов В.В., Шейко С.П., Шаломеев В.А., Воденникова О.С., Кулабниева О.А.

Күрделі динамикалық жүктеме кезінде триботүйіндістірулер бөлшектерінің тозуға төзімділігіне ортаның механикалық-химиялық әсерлерінің жылдамдатылған сынақтары.

Күрделі динамикалық жүктеме жағдайында триботүйіндістірулер бөлшектерінің тозуы қарастырылған. Көп компонентті динамикалық жүктеме кезінде үйкеліс жұптарын жылдамдатылған сынақтар әдісі ұсынылған. Контакттілі өзара әрекеттесу процесстерін модельдеуге арналған стенд конструкциясы, сонымен бірге әртүрлі майлау және салқындату ортасымен күрделі динамикалық жүктеме жағдайында жұмыс істейтін триботүйіндістірулердің тозуға төзімділігін зерттеуге арналған стенд конструкциясы ұсынылған. Өзірленген әдістеме бойынша триботүйіндістірулердің жанасу аймағындағы механикалық-химиялық түрлендірулердің тозуға төзімділікке әсерін бағалау нәтижелері келтірілген. Майлау-салқындату сұйықтығының құрамындағы жоғары молекулалық қосылыстардың ыдырау өнімдерінің триботүйіндістірулердің жанасу аймағындағы металдардың тозуға төзімділігіне әсерін бағалау мүмкіндігі көрсетілген. Ұсынылған материалдарды қолдану берілген жұмыс шарттары үшін үйкеліс жұптарының материалдарын негізді таңдауға, жаңа тозуға төзімді материалдар мен жабындарды, майлау және салқындату ортасының құрамын жасауға мүмкіндік береді.

Кілт сөздері: тозу, күрделі жүктеме, үйкеліс, стенд, полимер.

Цыганов В.В., Шейко С.П., Шаломеев В.А., Воденникова О.С., Кулабниева О.А.

Ускоренные испытания механохимического воздействия среды на износостойкость деталей трибосопряжений при сложном динамическом нагружении.

Рассмотрен износ деталей трибосопряжений в условиях сложного динамического нагружения. Предложена методика ускоренных испытаний пар трения при многокомпонентном динамическом нагружении. Представлены конструкции стендов для моделирования процессов контактного взаимодействия, исследований износостойкости трибосопряжений, которые работают в условиях сложного динамического нагружения с различной смазочно-охлаждающей средой. Приведены результаты оценки влияния механохимических превращений в зоне контакта трибосопряжений на износостойкость по разработанной методике. Показана возможность оценки эффективности влияния продуктов деструкции высокомолекулярных соединений в составе смазочно-охлаждающей жидкости на износостойкость металлов в зоне контакта трибосопряжений. Использование представленных материалов позволяет обоснованно выбирать материалы пар трения для заданных условий эксплуатации, разрабатывать новые износостойкие материалы и покрытия, состав смазочно-охлаждающей среды.

Ключевые слова: изнашивание, сложное нагружение, трение, стенд, полимер.

Шынарбек А.Б., Рахадиллов Б.К., Степанова О.А., Кусаинов Р.К., Жасулан А.Ж., Даумова Г.К.

30ХГСА болаттан жасалған жабындарды электр доғалық металдандыру процесін зерттеу.

Мақалада жабындардың құрылымы мен қасиеттеріне әсер ететін 30ХГСА болат сымдарының электрлік доғалық металдандыруының технологиялық режимдері қарастырылған. Электр доғалық бүрку SX-600 электр доғалық металлаторды қолдану арқылы жүргізілді. Алынған жабындардың қасиеттері мен сипаттамалары сымның берілу жылдамдығы, кернеу және ток күші сияқты бірнеше металдандыру параметрлеріне тәуелді. Электрондық микроскопия және металлографиялық талдау әдістерімен жабындардың құрылымы зерттелді. Жабын қатайтылған конвективті металл ағындарынан, микродәнекерленген ұсақ металл бөлшектерінен және оксидтерден тұратын қабатты құрылымға ие. Зерттеу нәтижелері металдандыру кезінде сым беру жылдамдығының жоғарылауы уақыт бірлігінде алынған жабын қалыңдығының артуына әкелетінін көрсетеді. 45 болаттың бетінде таңдалған режимге байланысты қалыңдығы 50 мкм-ден 370 мкм-ге дейінгі 30ХГСА болаттан жасалған жабындар пайда болды. Жабындарларды 30ХГСА сыммен ЭДМ бүрку кезінде беткі қабаттың микроқаттылығының мәні 45 болаттың микроқаттылығына қатысты 2 есе артатыны анықталды. Электрлік доғалық бүрку процесінің факторларының жабындардың құрылымы мен қасиеттеріне әсері туралы зерттеулердің нәтижелерін қорытындылай келе, 30 ХГСА болат доғалық металдандыруды болат субстраттарда қаттылығы жоғары жабындарды алу үшін қолдануға болады деген қорытынды жасауға болады.

Кілт сөздері: электр доғасын металдандыру, сым, жабын, болат, құрылым, микроқаттылық, тозуға төзімділік.

Шынарбек А.Б., Рахадиллов Б.К., Степанова О.А., Кусаинов Р.К., Жасулан А.Ж., Даумова Г.К.

Исследование процесса электродуговой металлизации покрытий из стали 30ХГСА

В статье рассмотрены технологические режимы электродуговой металлизации проволоки стали 30ХГСА, влияющих на структурообразование и свойства покрытий. Электродуговое напыление производилось с применением электродугового металлатора SX-600. Свойства и характеристики получаемых покрытий зависят от нескольких параметров металлизации, таких как скорость подачи проволоки, напряжение, и сила тока. Методами электронной микроскопии и металлографического анализа изучена структура покрытий. Покрытие имеет слоистую структуру, которая состоит из застывших конвективных потоков металла, микросваренных мелких металлических частиц и оксидов. Результаты исследования показывают, что увеличение скорости подачи проволоки при металлизации приводит к увеличению получаемой толщины

покрытия за единицу времени. На поверхности стали 45 в зависимости от выбранного режима сформировались покрытия из стали 30ХГСА толщиной в диапазоне от 50 мкм до 370 мкм. Установлено, что при напылении ЭДМ покрытий проволокой 30ХГСА значение микротвердости поверхностного слоя возрастает в 2 раза по отношению к микротвердости стали 45. Обобщая результаты исследований по влиянию факторов процесса электродугового напыления на структурообразование и свойства покрытий можно сделать вывод, что электродуговая металлизация стали 30ХГСА может использоваться для получения покрытий с повышенной твердостью на стальных подложках.

Ключевые слова: электродуговая металлизация, проволока, покрытие, сталь, структура, микротвердость, износостойкость.

Ибраимов М.К., Кожазулов Е.Т., Жексебай Д.М., Сарманбетов С.А.

Кристалл-жүйе негізіндегі радиоқұрылғының функционалдық блогын жүзеге асыру.

Бұл жұмыс кристалл - жүйе негізіндегі радиоқұрылғының функционалдық блогын жүзеге асыруға арналған. Негізгі назар бағдарламаланатын логикалық интегралдық схемаларда модуляция және жылдам Фурье түрлендіруі сияқты радиоқұрылғының блоктарын біріктіруге бағытталған. Модульдерді жобалаудың, тестілеудің және Radio Unit(RU) бірліктерінің өнімділігін онтайландырудың техникалық аспектілері егжей-тегжейлі қарастырылған. Нәтижелер көрсеткендей, Fifth Generation (5G) радио блогының 7.3 функционалдығын ортақ пайдалану кезінде модуляция блогы басқа блоктармен салыстырғанда логикалық интегралдық схемалардағы ресурстарының ең аз мөлшерін пайдаланады. Жылдам Фурье түрлендіруі блогы максималды пайдалануға болатын логикалық интегралдық схемалардағы өлшемі мен 250 МГц тактілік жиілікте кідіріс талаптарын қанағаттандыра алады. Бұл мақала заманауи радио жүйелерде өнімділігі жоғары функционалды блоктарды жобалауды және біріктіруді онтайландыруға мүдделі инженерлер мен зерттеушілер үшін ресурс ретінде қызмет етеді.

Кілт сөздері: логикалық интегралдық схемаларда, Zynq, Fifth Generation New Radio, радио блок, ортогональды жиілікті бөлу мультиплексирлеу.

Ибраимов М.К., Кожазулов Е.Т., Жексебай Д.М., Сарманбетов С.А.

Реализация функционального блока радиоустройства на основе системы-на-кристалле.

Данная статья посвящена реализации функционального блока радиоустройства на основе системы-на-кристалле. Основное внимание уделяется интеграции блоков радиоустройства, таких как модуляция и быстрое преобразование Фурье, на программируемых вентилях матрицах. Подробно рассматриваются технические аспекты проектирования, тестирования модулей и оптимизацию производительности блоков радиоустройства. Результаты показывают, что при разделении функциональности радиоблока 7.3 технологии Fifth Generation (5G) блок модуляции использует минимальное количества ресурсов программируемых вентилях матрицах по сравнению с остальными блоками. Блок быстрого преобразования Фурье может соответствовать требованию задержки при максимально используемой размере и тактовой частоте программируемых вентилях матрицах 250 МГц. Эта статья служит ресурсом для инженеров и исследователей, заинтересованных в оптимизации процесса разработки и интеграции высокопроизводительных функциональных блоков в современных радиосистемах.

Ключевые слова: Программируемая логическая интегральная схема, Zynq, Fifth Generation New Radio, Radio Unit, многолучевой доступ с ортогональным разделением частот.

Лобода Ю. О., Гальцева О. В., Бирюкова Н. С.

"Bioid Premium Kit" конструкция негізінде жылан роботының қозғалысының физикалық сипаттамаларын зерттеу.

Мақалада жылан робот қозғалысының физикалық сипаттамалары қарастырылған. Берліген жұмыстың негізгі мақсаты - өндірістік робот-манипулятор пен мобильді робот үшін қоршаған ортаның әртүрлі жағдайларында қозғалуға мүмкіндік беретін жылан роботтың қозғалысының физикалық сипаттамаларын зерттеуге негізделген алгоритм жасау болып табылады. Жұмыс барысында робот-жыланның әртүрлі беттердегі қозғалыс теңдеулері алынды. Жылан роботы ашық кинематикалық тізбек екендігі анықталды, оның элементтері кинематиканың тікелей және кері есептерін шешуге және робот блогының берілген бағыттағы орнын есептеуге негізделген бес немесе одан да көп кинематикалық айналу түйіндерімен өзара байланысты. Жыландардың физикалық қозғалысын зерттеу негізінде жылан роботының қозғалысының патенттелген алгоритмі жасалды. Robotis BIOLOID Premium жиынтығына негізделген жылан роботының прототипі құрастырылып, жеті түрлі бетте сынақ жүргізілді. Құрастырылған жоғары жылдамдықты прототип он бір блоктан және дөңгелектері жоқ CM-530 контроллерінен тұрады және дамыған алгоритмді қолдану арқылы аналогтармен салыстырғанда жоғары қозғалыс жатықтығын қамтамасыз етеді.

Кілт сөздері: жылан роботының алгоритмі, жыланның қозғалысы, жылан роботы, физикалық сипаттамалары, басқару элементтері, RoboPlus.

Лобода Ю.О., Гальцева О.В., Бирюкова Н.С.

Изучение физических характеристик движения робота-змеи на основе конструкции “Bioloid Premium Kit”.

В статье рассматриваются физические характеристики движения робота-змеи. Основной целью данной работы является разработка алгоритма, основанный на изучении физических характеристик движения робота-змеи, который позволит передвигаться в различных условиях окружающей среды, как промышленному роботу-манипулятору, так и мобильному роботу. В ходе работы были получены уравнения движения робота-змеи по различным поверхностям. Установлено, что робот-змея представляет собой разомкнутую кинематическую цепь, элементы которой соединены между собой пятью или более кинематическими узлами вращения на основе решения прямых и обратных задач кинематики и расчета положения блока робота в заданной ориентации. На основе изучения физических движений змей был разработан запатентованный алгоритм передвижения робота-змеи. Прототип робота-змеи, основанный на наборе ROBOTIS BIOLOID Premium, был собран и протестирован на семи различных поверхностях. Созданный высокоскоростной прототип состоит из одиннадцати блоков и контроллера CM-530 без колес и обеспечивает высокую плавность передвижения по сравнению с аналогами благодаря использованию разработанного алгоритма.

Ключевые слова: алгоритм робота-змеи, движение змеи, змеевидный робот, физические характеристики, управление, RoboPlus.

Турлыкожаева Д.А., Усінов Н.М., Байгалиева А.Н., Темешева С.А., Болысбай А.Т., Абрахматова Г.А., Ахтанов С.Т.

Ақпараттық энтропия теориясына негізделген сымсыз торлы желіге арналған маршруттау көрсеткіші және протоколы.

Ұсынылған мақалада пакеттің жоғалу ықтималдығын ескеретін көрсеткішті есептеу үшін ақпараттық энтропия теориясына негізделген маршруттау алгоритмі берілген. Ақпараттық энтропия теориясы деректерді берудегі белгісіздік пен тәртіпсіздікті бағалаудың сенімді негізі ретінде қызмет етеді, бұл тұрақты және интеллектуалды маршруттау стратегиясын әзірлеуді жеңілдетеді. Қолданыстағы алгоритмдерден айырмашылығы, ұсынылған тәсіл максималды тиімділікке жету үшін маршруттау процесін онтайландыру арқылы желі ішіндегі деректерді беру сапасын дәлірек бағалауға мүмкіндік береді. Эксперимент нәтижелері жоғары өнімділікті сақтай отырып, желіге қызмет көрсету сапасының айтарлықтай жақсарғанын көрсетеді. Алгоритмнің тиімділігін тексеру үшін өткізу қабілеттілігі, кідіріс және пакеттің жоғалуы сияқты негізгі өнімділік көрсеткіштерін бағалайтын бірқатар эксперименттер жүргізілді. Сондай-ақ, белгілі алгоритмдерге қатысты артықшылықтар мен кемшіліктерді бағалауға мүмкіндік беретін белгіленген маршруттау алгоритмдерімен салыстырмалы талдау жүргізілді. Нәтижелер ұсынылған алгоритм деректер сапасын және желінің жалпы тиімділігін онтайландыруда дәстүрлі маршруттау әдістерінен асып түсетінін көрсетеді.

Кілт сөздері: маршруттау, энтропия, ақпарат, сымсыз торлы желі.

Турлыкожаева Д.А., Усінов Н.М., Байгалиева А.Н., Темешева С.А., Болысбай А.Т., Абрахматова Г.А., Ахтанов С.Т.

Метрика маршрутизации и протокол для беспроводной ячеистой сети, основанные на теории информационной энтропии

В представленной статье представлен алгоритм маршрутизации, основанный на теории информационной энтропии, для вычисления показателя, учитывающего вероятность потери пакета. Теория информационной энтропии служит надежной основой для оценки неопределенности и беспорядка при передаче данных, облегчая разработку более устойчивой и интеллектуальной стратегии маршрутизации. В отличие от существующих алгоритмов, предлагаемый подход позволяет более точно оценивать качество передачи данных внутри сети, оптимизируя процесс маршрутизации для достижения максимальной эффективности. Результаты эксперимента демонстрируют значительное повышение качества обслуживания сети при сохранении высокой производительности. Для проверки эффективности алгоритма была проведена серия экспериментов, оценивающих ключевые показатели производительности, такие как пропускная способность, задержка и потеря пакетов. Также был проведен сравнительный анализ с установленными алгоритмами маршрутизации, позволивший оценить преимущества и недостатки по отношению к хорошо известным алгоритмам. Полученные результаты свидетельствуют о том, что предложенный алгоритм превосходит традиционные методы маршрутизации в оптимизации качества передачи данных и общей эффективности сети.

Ключевые слова: маршрутизация, энтропия, информация, беспроводная ячеистая сеть.

Плотников И.В., Короткий И.А., Неверов Е.Н., Короткая Е.В., Плотникова Л.В.

Агроөнеркәсіптік кешеннің қайта өңдеу өндірістері үшін мехатронды су дайындау модулін модернизациялау.

Агроөнеркәсіптік кешен объектілері суды әртүрлі мақсаттарда пайдаланады, олар тұтынатын судың көлемі едәуір үлкен, 60 км^3 судан асатын табиғи су объектілерінен ресурс ретінде жыл сайын төрттен бір бөлігі агроөнеркәсіптік кешендерге келеді, мұндай жуықталған мәліметтер ауыл шаруашылық сияқты ірі су тұтынушыға жатқызуға мүмкіндік береді. Бұл жағдайда маңызды параметрлердің бірі - суды дайындау әдісі әсер ететін судың сапасы болып табылады. Суды дайындаудың ең перспективті әдісі криоконцентрлеу болып табылады, ол ылғалдың кристалдануынан, содан кейінгі қатты фазаның ығысуынан құрылады. Бұл процестің және оның аппараттық конструкциясының жетілмегендігі бұл әдісті өндіріске енгізуді тежейді. Суды дайындау кезінде криоконцентрлеу әдісінің өнімділігін арттыру мақсатында рекуперациялаумен карусель типті аппараттың жаңа конструкциясы құрастырылып жасалды. Кристаллизатпен қажетсіз элементтерді ұстауын азайту және кристалдану процесінің сипатын анықтау үшін криоконцентратордың жұмыс пластиналарда процестің ұтымды параметрлерін орнатуға мүмкіндік беретін бірқатар эксперименттер жүргізілді. Бұл авторларға карусель типті аппарат үшін мехатронды криоконцентрлеу модулін жасауға мүмкіндік берді.

Кілт сөздері: криоконцентрлеу, суды дайындау, карусель типті криоконцентратор, криоконцентратордың мехатрондық модулі.

Плотников И.В., Короткий И.А., Неверов Е.Н., Короткая Е.В., Плотникова Л.В.

Модернизация мехатронного модуля водоподготовки для перерабатывающих производств агропромышленного комплекса

Объекты агропромышленного комплекса, используют воду в различных целях, объем потребляемой ими воды достаточно велик, при общем ежегодном изъятии воды, как ресурса, из природных водных объектов превышающем 60 км^3 воды, до четверти приходится на агропромышленные комплексы, даже такие приближенные данные позволяют отнести сельское хозяйство к крупнейшему водопотребителю. При этом одним из важных параметров является качество воды, на которое влияет способ водоподготовки. Наиболее перспективным способом водоподготовки является криоконцентрирование, которое заключается в кристаллизации влаги с последующим вытеснением твердой фазы. Несовершенство данного процесса и его аппаратного оформления сдерживает внедрение данного способа в производство. С целью повышения производительности метода криоконцентрирования при проведении водоподготовки была разработана новая конструкция аппарата карусельного типа с рекуперацией. Для снижения захвата нежелательных элементов кристаллизатом и определения характера протекания процесса кристаллизации на рабочих пластинах криоконцентратора была проведена серия экспериментов, позволяющая установить рациональные параметры процесса. Это позволило авторам разработать мехатронный модуль криоконцентрирования для аппарата карусельного типа.

Ключевые слова: криоконцентрирование, водоподготовка, криоконцентратор карусельного типа, мехатронный модуль криоконцентратора.

Жанабаев З.Ж., Ахтанов С.Т., Тілеу А.О., Әлмен Д.Б.

Лазерлік газ сенсорындағы когерентті амплитудалық модуляция.

Мақала ғылым мен техникадағы өзекті тақырыпқа – лазердің көмегімен газдың түрі мен концентрациясын анықтауға арналған. Жасыл лазер сәулеленуінің қарқындылығы мен ығысу кернеуінің жақын мәндерінде фотодиодтың шығыс сигналының уақыттық қатарының интерференциялық үлгілері алынды. Когеренттілік дәрежесі ($\sim 0,1$ -ден жоғары) газдардың түрлерін және олардың концентрацияларын ажыратуға мүмкіндік берді. Сигнал когеренттілігі Аллан девиациясы мәндерімен бақыланды. Зерттеу әдісінің жаңалығы модуляцияның негізгі жиілігі ретінде электр желісінің гармоникасын таңдау болып табылады. Корреляциялық функциялар мен сәйкес қуат спектрлері молекулалардың және олардың шоғырларының төмен жиіліктегі тербелістеріне сезгіш болатыны көрсетілген. Бұл бөлме қысымы мен температурасында оптикалық аспаптардың үлкен өлшемді және қымбат кешендерінің орнына осы жұмыстың нәтижелері мен әдістерін нақты жағдайларда қолдануға мүмкіндік береді.

Кілт сөздері: лазер, газ сенсоры, төмен жиіліктер, фотодиод, аммиак.

Жанабаев З.Ж., Ахтанов С.Т., Тілеу А.О., Әлмен Д.Б.

Когерентная амплитудная модуляция в лазерном газосенсоре.

Статья посвящена актуальной теме науки и техники – определению вида и концентрации газа использованием лазера. При близких значениях интенсивности лазерного излучения зеленого цвета и напряжения смещения фотодиода получены интерференционные картины временного ряда выходного сигнала фотодиода. Степень когерентности (более чем $\sim 0,1$) позволил различить виды газов и их концентрации. Когерентность сигналов контролировалась значениями девиации Аллана. Новизной метода исследования является выбор в качестве

основной частоты модуляции гармонику электрической сети. Показано, что функции корреляций и соответствующие спектры мощности чувствительны к низкочастотным флуктуациям молекул и их сгустков. Это позволяет использовать результаты и методику настоящей работы в конкретных случаях вместо крупногабаритных и дорогостоящих комплексов оптических приборов при комнатных значениях давления и температуры.

Ключевые слова: лазер, газовый сенсор, низкие частоты, фотодиод, аммиак.

Маликов В.Н., Катасонов А.О., Ишков А.В., Фадеев Д.А., Войнаш С.А., Ворначева И.В., Заидуллин Р.Р., Шмыкова П.А.

Жұқа металл қабыршақтардың біртексіздігі мен ақауларын зерттеудің құйынды ток әдісі.

Жұқа металл қабыршақтардың қалыңдығының аздығымен байланысты әртүрлі құрылымдар мен ерекше қасиеттер олардың физикалық сипаттамалары массивтік күйдегі сондай материалдардан айтарлықтай ерекшеленетіндігіне әкеледі. Жұқа металл қабыршақтарының сипаттамаларын анықтау үшін бұзбайтын зерттеудің жаңа әдістерін әзірлеу өзекті болып табылады. Мақалада әртүрлі металдардың жұқа металл қабыршақтарының бетін зерттеу үшін құйынды токты бақылау әдісінің артықшылықтары негізделген. Жұқа металл қабыршақтарының электр өткізгіштігін, қалыңдығын және зақымдану дәрежесін зерттеуге арналған аса кіші құйынды ток түрлендіргішінің конструкциясы ұсынылған, сонымен қатар әзірленген түрлендіргішті басқаруға мүмкіндік беретін бағдарламалық-аппараттық кешен жасалған. Металл қабыршақтары зерттеу негіздеме бетіне заттың таралуының біртексіздігін көрсетті. Сондай-ақ, әзірленген түрлендіргіштің сигнал амплитудасының қабыршақ қалыңдығына тәуелділігі анықталды. Алынған нәтижелерді тексеру үшін фотометриялық әдіспен қабыршақтардың жарықтың өткізуіне зерттеу жүргізілген. Екі әдіспен алынған өлшеу нәтижелерін салыстыру әзірленген қабыршақтарды зерттеу әдістері арасындағы жоғары үйлесімділікті көрсетті.

Кілт сөздері: жұқа қабыршақтар, металдар, құйынды ток түрлендіргіші, материалдарды зерттеу, қабыршақтың біртексіздігі.

Маликов В.Н., Катасонов А.О., Ишков А.В., Фадеев Д.А., Войнаш С.А., Ворначева И.В., Заидуллин Р.Р., Шмыкова П.А.

Вихретоковый метод исследования неоднородностей и дефектов тонких металлических пленок.

Многообразие структуры и специфические свойства, связанные с малостью толщины тонких металлических пленок, приводит к тому, что их физические характеристики существенно отличаются от характеристик этих же материалов в массивном состоянии. Для определения характеристик тонких металлических пленок актуальна разработка новых методов неразрушающего исследования. В статье обосновываются достоинства метода вихретокового контроля для исследования поверхности тонких металлических пленок различных металлов. Представлена конструкция сверхминиатюрного вихретокового преобразователя, предназначенного для исследования электропроводности, толщины и степени повреждения тонких металлических пленок, а также сконструирован программно-аппаратный комплекс, позволяющий производить управление разработанным преобразователем. Исследование металлических пленок позволило показать неоднородность распределения вещества по поверхности подложки. Также была определена зависимость амплитуды сигнала разработанного преобразователя от толщины пленки. Для проверки получаемых результатов были проведены исследования светопропускания пленок фотометрическим методом. Сравнение результатов измерений, полученных двумя методами, показали высокую степень согласованности между двумя разработанными методами исследования пленок.

Ключевые слова: тонкие пленки, металлы, вихретоковый преобразователь, исследования материалов, неоднородность пленки.

Шишулин А.В., Потапов А.А., Шишулина А.В.

Қабыршақты қатты ерітінділердің фракталдық пішінді нанобөлшектері: морфологияның ауыр вольфрам псевдокорытпаларындағы фазалық тепе-теңдікке әсері.

Физика-химиялық қасиеттердің бірегей жиынтығының арқасында нанокұрылымды ауыр вольфрам псевдокорытпалары, әсіресе ұнтақты металлургияның заманауи аддитивті технологияларының нысаны ретінде жоғары қызығушылық тудырады. Берілген жұмыста W-Cr ауыр қорытпасының мысалында core-shell қабыршақтайтын қатты ерітінді құрылымы бар нанобөлшектер үшін фазалық тепе-теңдіктің морфологияға тәуелділігі термодинамикалық түрде модельденген. Нанобөлшектердің морфологиясы фракталдық геометрия әдістерін қолдану арқылы берілген. Тепе-теңдік фазалық құрамы мен әртүрлі гетерогенді күйлердің температура мен нанобөлшектердің морфологиясына тәзімділігі жүйенің бос энергиясын төмендетудің үш механизмі негізінде түсіндіріледі. Жұмыстың соңғы бөлігінде нанобөлшектер ансамбльдеріндегі өлшемдер мен орташа сипаттамалар бойынша тепе-теңдік үлестірулерін есептеу әдісі, сондай-ақ микроскопия мәліметтері негізінде нанобөлшектердің фракталдық өлшемін өлшеу әдісі сипатталған.

Кілт сөздері: нанобөлшектер, қабыршақтау, вольфрам, хром, фракталдық өлшемділік.

Шишулин А.В., Потапов А.А., Шишулина А.В.

Наночастицы фрактальной формы расслаивающихся твердых растворов: влияние морфологии на фазовые равновесия в тяжелых вольфрамовых псевдосплавах

Благодаря уникальному набору физико-химических свойств наноструктурированные тяжелые вольфрамовые псевдосплавы являются объектом повышенного интереса, в особенности как объект для современных аддитивных технологий порошковой металлургии. В настоящей работе термодинамически смоделирована зависимость фазовых равновесий от морфологии для наночастиц со структурой core-shell расслаивающегося твердого раствора на примере тяжелого сплава W-Cr. Морфология наночастиц задавалась с использованием методов фрактальной геометрии. Полученные зависимости равновесного фазового состава и устойчивости различных гетерогенных состояний от температуры и морфологии наночастиц интерпретированы на основе трех механизмов понижения свободной энергии системы. В заключительной части работы описан метод расчета равновесных распределений по размерам и средних характеристик в ансамблях наночастиц, а также методика измерения фрактальной размерности наночастиц непосредственно на основе данных микроскопии.

Ключевые слова: наночастицы, расслаивание, вольфрам, хром, фрактальная размерность.