

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА НАНОМОДИФИЦИРОВАНИЯ КЕРАМИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ

Чернецкий И.В.¹, Карташов В.В.¹

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: v4ernetskiy@urfu.ru

MODELING THE PROCESS OF NANOMODIFICATION OF CERAMIC MATERIALS BASED ON ZIRCONIUM DIOXIDE

Chernetskiy I.V.¹, Kartashov V.V.¹

¹⁾ Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin,
Ekaterinburg, Russia

In the conditions of modern technological progress, computer modeling capabilities are used to optimize industrial processes. This saves a huge amount of time and money in conducting expensive experiments. In this paper, we studied models of additives of various nanopowders to a micron sized matrix.

В условиях современного технологического прогресса для оптимизации промышленных процессов используют возможности компьютерного моделирования. В последнее время появляется всё больше исследований, связанных с созданием наносистем и наноустройств, благодаря интенсивному развитию различных расчетных методов. Практическое их применение позволяет сэкономить огромное количество времени и средств на проведении дорогостоящих экспериментов.

В нашем случае, виртуальная модель должна объективно показать (предсказать) поведение различных компонентов в процессе синтеза керамических образцов. [1] В данной работе изучены модели добавок различных нанопорошков к матричному порошку микронных размеров. Во всех случаях основным компонентом выступает диоксид циркония частично стабилизированный оксидом иттрия (5%). Используемые нанопорошки, аналогичные по химическому составу, различаются методами получения, гранулометрическим составом и внутренней структурой. Особого внимания заслуживает размерный порядок нанопорошков в соотношении с матричным компонентом. При разнице в размерах в 3 порядка и более, в синтезированных образцах могут быть достигнуты особые эффекты, что может привести к увеличению прочности, каталитической активности и т.д. Именно тут возникают основные технические трудности, связанные с моделированием на атомном уровне макрообъектов. [2] Такие сложные системы с большим количеством атомов требуют огромных вычислительных мощностей.

1. I. V.Chernetskiy, A.V. Vlasov, V.V. Kartashov, E.I.Denisova. Modeling structure of powders during hot pressing (статья) // International Journal of Applied Engineering Research ISSN 0973-4562 Volume 9, Number 22 (2014) pp. 17851-17858

2. С. В. Звонарёв. Основы математического моделирования: учебное пособие. Издательство Уральского федерального университета. (2019)

ТЕРМОЭДС ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ СТРУКТУР $\text{In}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$

Четверикова А. П.¹, Каширин М. А.¹, Макагонов В. А.¹, Фошин В. А.¹

¹) Воронежский государственный технический университет, г. Воронеж, Россия
E-mail: alina.chetverikova@mail.ru

THERMOEMF OF THIN-FILM STRUCTURES $\text{In}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$

Chetverikova A. P.¹, Kashirin M. A.¹, Makagonov V. A.¹, Foshin V. A.¹

¹) Voronezh State Technical University, Voronezh, Russia

Thin films ($\text{In}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$)₂₅ were by ion-beam sputtering. The effect of heat treatment on the phase composition and thermopower is studied. Increasing of annealing temperature – a thermopower was decrease. After annealing, the structure of thin films is preserved up to a temperature of 500°C

Пленки на основе оксида индия можно рассматривать в качестве материала для электродов термопар, работающих в окислительных или восстановительных средах [1]. Однако, вопрос стабильности характеристик такой термопары остается открытым.

Многослойные наноструктуры ($\text{In}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$)₂₅ были получены методом ионно-лучевого распыления с последовательным осаждением материала оксидных мишеней In_2O_3 и SiO_2 . Слой SiO_2 осаждался через V - образный экран, а оксид индия напылялся без экрана. Таким образом, в полученных образцах состоящих из 25 бислоев $\text{In}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$ при одинаковой толщине In_2O_3 меняется толщина слоя SiO_2 . По результатам рентгеноструктурного анализа установлено, что все образцы $\text{In}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$ имеют рентгеноаморфную структуру. В области малых углов наблюдаются максимумы на кривых рентгеновской рефлектометрии. Рассчитанные значения толщины бислоев сформированных структур составили 6,3 – 7,8 нм.

Исследование коэффициента термоЭДС проводили при температуре окружающей среды методом горячего зонда. Термическая обработка образцов в вакуумной камере (остаточное давление $P=5 \cdot 10^{-2}$ Торр), осуществляли последовательно по циклу «нагрев-выдержка-охлаждение». время выдержки составляло 30 минут в интервале 200 – 600°C. Экспериментальные данные представлены графике.