

ностью. Также проведен расчет ориентационных факторов при выборе определенного набора ориентаций с наиболее высокими плотностями. Получена количественная информация о текстуре поликристаллического образца, позволяющая рассчитать ориентационные факторы. Рассчитанные ориентационные факторы были использованы при вычислении эффективных свойств поликристаллического образца и сравнивались с результатами расчетов независимых исследователей. Результаты численного эксперимента позволяют сделать вывод об адекватности предлагаемого метода количественного описания текстуры.

1. Лобанов М. Л. , Юровских А. С., Кардолина Н. И., Русаков Г. М. Методы исследования текстур в материалах. Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, (2014).
2. Остапович К.В., Трусов П.В. Вычислительная механика сплошных сред, т. 12, № 1, с. 67-79 (2019).
3. Мокрова С.М., Петров Р.П., Милич В.Н. Вестник Удмуртского ун-та. Мат. Мех. Компьютерные науки, т. 26, № 3, с. 336-344 (2016).

ТЕРМОДИНАМИКА РАЗУПОРЯДОЧЕНИЯ $\text{YBaCo}_2\text{O}_{6-\Delta}$

Яговитин Р.Е.¹, Иванов И.Л.¹, Зуев А.Ю.¹, Цветков Д.С.¹, Малышкин Д.А.¹,
Середа В.В.¹

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: roman.iagovitin@gmail.com

THERMODYNAMICS OF DISORDERING OF $\text{YBaCo}_2\text{O}_{6-\Delta}$

Yagovitin R.E.¹, Ivanov I.L.¹, Zuev A. Yu.¹, Tsvetkov D.S.¹, Malyshkin D.A.¹,
Sereda V.V.¹

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

Values of oxygen nonstoichiometry δ of $\text{YBaCo}_2\text{O}_{6-\delta}$ were determined at temperature range $T = 300 \div 500$ °C and partial oxygen pressure range $\lg(p\text{O}_2 / \text{atm}) = -0.63 \div -2.13$. Defect structure model of $\text{YBaCo}_2\text{O}_{6-\delta}$ was made and values of thermodynamic functions of quasichemical processes were determined.

Сложные оксиды со структурой двойного перовскита $\text{LnBaCo}_2\text{O}_{6-\delta}$, где Ln – редкоземельный элемент, являются перспективными материалами для создания кислородпроницаемых мембран и катодов твердооксидных топливных элементов. Физико-химические свойства данных оксидов во многом определяются содержанием в них кислорода, которое, в свою очередь, зависит от температуры T и парциального давления кислорода в атмосфере $p\text{O}_2$. В настоящей работе было изучено влияние указанных факторов на содержание кислорода в $\text{YBaCo}_2\text{O}_{6-\delta}$.

Образец сложного оксида был получен по стандартной керамической технологии. Фазовый состав полученного образца был изучен методом рентгенофазового анализа. Содержание кислорода в оксиде при различных условиях было определено с помощью метода термогравиметрического анализа и метода проточного реактора, который впервые был предложен Немудрым с соавторами [1]. Термогравиметрические измерения проводились с использованием термовесов DynTHERM LP-ST (Rubotherm, Германия). Для изучения кислородной нестехиометрии сложного оксида методом проточного реактора была сконструирована установка, ключевым элементом которой является трубчатый кварцевый реактор, помещенный в печь и соединенный с системой подачи газа, датчиком парциального давления кислорода и пенным расходомером. Образец оксида помещали в реактор, нагревали до заданной температуры и обдували потоком воздуха. После установления состояния равновесия в реакторе поток воздуха резко заменяли на поток смеси воздуха и азота с остаточным $pO_2 = 10^{-4}$ атм и дожидались установления состояния равновесия в системе. Кривые релаксации парциального давления кислорода в системе использовали для расчетов изменения кислородной нестехиометрии оксида. По результатам серии экспериментов была получена зависимость вида $\delta = f(T, pO_2)$.

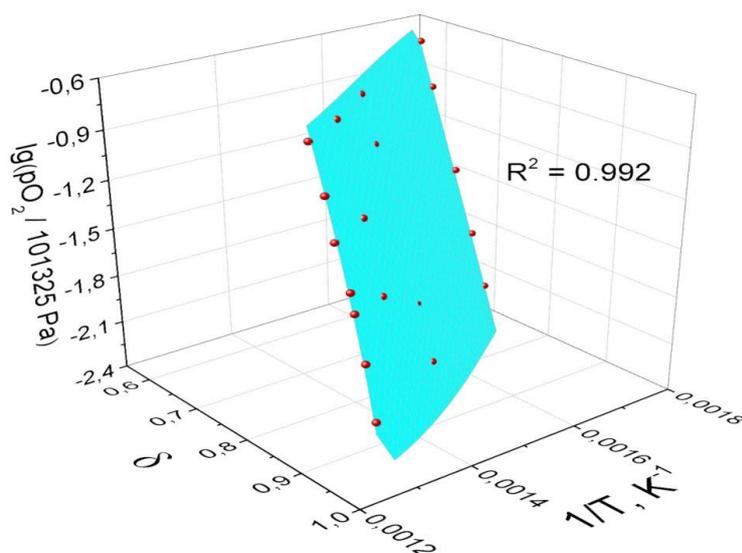


Рис. 1. Результаты верификации модели дефектной структуры, предложенной для $YBaCo_2O_{6-\delta}$.

Кислородный обмен оксида с атмосферой был рассмотрен с позиции квазихимического подхода к описанию процессов дефектообразования. В основу модели кислородного обмена положены квазихимические реакции выделения кислорода из решетки оксида, диспропорционирования Co^{3+} и образования кластеров между атомами иттрия и вакансиями атомов кислорода. В результате верификации модели были определены значения термодинамических функций описанных квазихимических процессов. Высокое значение коэффициента детерминации свидетельствует о корректности предложенной модели. Также было проведено

сопоставление результатов моделирования, приведенных в настоящей работе и работе [2].

1. Немудрый А.П., Старков И.А., Бычков С.Ф. Высокотемпературное определение кислородной нестехиометрии в оксидах с ион-электронной проводимостью // Неорганические материалы, 2013, т. 49, №8, с. 899 – 903.
2. Седнев-Луговец А.Л. Термодинамическая устойчивость и физико-химические свойства двойных перовскитов $\text{YBaCo}_2\text{O}_{6-\delta}$ и $\text{HoBaCo}_2\text{O}_{6-\delta}$: дис. канд. хим. наук. – Екатеринбург, 2020. – 108 с.

ПРИЧИНЫ ПОВЫШЕННОГО РАЗБРОСА МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ РЕАКТОРНОГО ИЗДЕЛИЯ ИЗ СПЛАВА Zr-2,5% Nb

Ярков В.Ю.^{1,2}, Аверин С.А.², Пастухов В.И.², Устинов А.Е.^{1,2},
Цыгвинцев В.А.², Вельмогин Д.Н.², Лобанов М.Л.¹

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²⁾ Институт реакторных материалов, г. Заречный, Россия

E-mail: valick99@gmail.com

REASONS FOR THE INCREASED DISPERSION IN THE MECHANICAL CHARACTERISTIC OF THE REACTOR PRODUCT MADE FROM Zr-2,5% Nb

Yarkov V.Yu.^{1,2}, Averin S.A.², Pastukhov V.I.², Ustinov A.E.^{1,2},
Tsygvintsev V.A.², Velmogin D.N.², Lobanov M.L.¹

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²⁾ Institute of reactor materials, Zarechny, Russia

Methods of electronic microscopy, tensile testing, X-ray analysis on samples of a product made of Zr-2.5% Nb have been used to determine the reasons for properties dispersion of structural behavior during tensile testing. The process of sample preparation before testing is optimized.

Необходимой частью процедур, обеспечивающих длительную и бесперебойную эксплуатацию различного рода функциональных изделий и элементов конструкций ядерных реакторов, являются периодические испытания для определения механических свойств. Важными изделиями для обеспечения безопасной работы уран-графитовых реакторов атомных станций – трубы из сплава Zr-2,5% Nb. При проведении периодического контроля по механическим свойствам подобных изделий, осуществляемого в соответствии с нормативной документацией, нередко наблюдается повышенный разброс кратковременных механических свойств.