

3. Леонтьев Л.И., Шешуков О.Ю., Цепелев В.С. и др. Технологические особенности переработки сталеплавильных шлаков в строительные материалы и изделия //Строительные материалы. 2014. №10. С.70-73.
4. Черноусов П.И. Рециклинг. Технология переработки и утилизации техногенных образований и отходов в чёрной металлургии: моногр. /М. Изд. Дом МИСиС, 2011. - 428 с.
5. Дильдин А.Н., Чуманов В.И., Чуманов И.В., Еремяшев В.Е Твердофазное восстановление отходов сталеплавильного производства //Металлург. 2012. № 2. С. 36-40.
6. V. P. Kepplinger, "State of the art of liquid-phase reduction of cast iron," Chernye Metally, No. 1, 19 (2010).
7. Дильдин А.Н., Чуманов И.В., Еремяшев В.Е. Об использовании отвальных шлаков Златоустовского металлургического завода // Электрометаллургия. 2015. №4. С.28-33.
8. Dil'din A.N., Chumanov I.V. Study of the Processes of Metal Recovery from Steel Slags // Indian Journal of Science and Technology. Vol 8(34), December 2015.

## **ОСОБЕННОСТИ СТРОЕНИЯ И СВОЙСТВ КУБИЧЕСКОГО НИТРИДА АЛЮМИНИЯ И ЛЕГИРОВАННОГО СОСТАВА $Al_{1-x}Ti_xN$**

Кудрякова В.С., Елагин А.А., Шишкин Р.А., Муратов В.Д.

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

\*E-mail: [valeriya\\_kudryakova@mail.ru](mailto:valeriya_kudryakova@mail.ru)

## **SPECIFICITY OF CUBIC $AlN$ AND DOPED COMPOUND $Al_{1-x}Ti_xN$ STRUCTURE AND PROPERTIES**

V. S. Kudryakova, A. A. Elagin, R. A. Shishkin, A. R. Beketov

Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Dependence of  $AlN$  polymorphic structure on thermal conductivity was considered. Due to higher thermal conductivity of metastable cubic structured  $AlN$  in compare with wurtzite-type  $AlN$ , one of potential ways to stabilize cubic  $AlN$  by  $Ti$  doping was evaluated.

Наибольшей теплопроводностью среди нитридов третьей группы обладает нитрид алюминия, который при нормальных условиях стабилен в гексагональной структуре. Однако, известны и кубические фазы нитрида алюминия со структурой  $NaCl$  ( $d = 4,045 \text{ \AA}$ ) и со структурой  $ZnS$  ( $d = 4,38 \text{ \AA}$  и  $d = 7,913 \text{ \AA}$ ). Термодинамические и теплопроводящие свойства  $AlN$ , как неметаллического материала, полностью обусловлены фононами. Длина свободного пробега фононов является важнейшей физической характеристикой, которая играет решающую роль в определении таких свойств. Длина свободного пробега фононов в кубической кристаллической решетке по сравнению с гексагональной при  $T_{комн}$  и выше

примерно в четыре раз больше, а теплопроводность – в 2,7 раз больше [1]. Существует две основные причины, почему теплопроводность нитрида в кубической фазе выше, чем в гексагональной: во-первых, кубическая структура более простая, чем гексагональная и имеет только три оптические ветви колебаний, в гексагональной структуре девять ветвей способствует значительно большему фонон-фононному взаимодействию; во-вторых, средняя скорость фононов в гексагональной решетке меньше, чем в кубической.

Стабилизация нитрида алюминия в кубической структуре является сложной технологической задачей, одно из решений которой - легирование AlN титаном, нитрид которого имеет схожую с AlN кубическую кристаллическую структуру, поскольку атомные радиусы Al и Ti достаточно близки ( $R_{Al} = 1.43 \text{ \AA}$ ,  $R_{Ti} = 1.46 \text{ \AA}$ ).

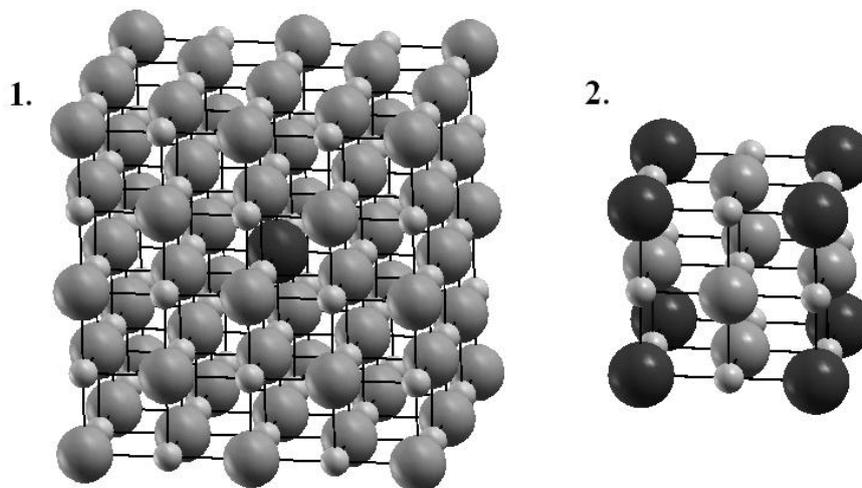


Рис. 1. Кубическая ячейка, моделирующая легированную  $r\text{-Al}_{1-x}\text{Ti}_x\text{N}$  фазу при: 1 –  $x = 0.03$  ( $\text{Al}_{31}\text{TiN}_{32}$ ); 2 –  $x = 0.25$  ( $\text{Al}_3\text{TiN}_4$ ). Крупные шары – атомы металла (темные – Ti, светлые – Al), малые – атомы азота.

По результатам первопринципных зонных расчетов выполнено исследование фазовой стабильности, электронного строения и магнитных свойств соединений формального состава  $\text{Al}_{31}\text{TiN}_{32}$  и  $\text{Al}_3\text{TiN}_4$  на основе кубического нитрида алюминия, моделирующих легированные титаном  $\text{Al}_{1-x}\text{Ti}_x\text{N}$  кубические фазы при малых ( $x=0.03$ , одиночные дефекты) и достаточно больших ( $x=0.25$ , твердый раствор с регулярной решеткой) концентрациях примеси. Показано, что фаза  $\text{Al}_{0.97}\text{Ti}_{0.03}\text{N}$ , включающая одиночные дефекты, является метастабильной по отношению к смеси металлического титана и кубического AlN. Однако, величина энтальпии частичного замещения алюминия титаном невелика, позволяет сделать вывод о том, что образование такой фазы вполне вероятно.

1. Alshaikhi, A., Srivastava, G.P., Phys. Rev. B – Cond. Matt. and Mater. Phys., 76/19, 195205 (2007).