

Это явление анализировалось на основе представлений о взаимодействии намагниченности и структурных дефектов при движении доменных границ. Между намагниченностью и дислокационной структурой существует магнитоэластическое взаимодействие, природа которого обусловлена разориентировкой спиновых магнитных моментов внутри междоменной границы. При воздействии внешним магнитным полем изменение направления спинов сопровождается магнитоэластическими изменениями размеров, что при условии когерентности границы с матрицей приводит к появлению упругих напряжений, поля которых взаимодействуют с полями упругих напряжений дислокаций. Магнитоэластическую энергию взаимодействия междоменной границы и дислокационной петли можно записать как  $W = b_k \int_{S_d} s_{ik}^m dS_i$ , где  $s_{ik}^m$  - тензор упругих напряжений,

вызванных магнитоэластикой ( $i, k$  - принимают значения 1, 2, 3, соответствующие декартовым координатам);  $b_k$  -  $k$ -я компонента вектора Бюргера дислокационной петли;  $S_d$  - поверхность, в которой находится дислокационная петля;  $S_i$  - проекция этой поверхности на  $i$ -ую координатную плоскость. Приближенные оценки показывают, что значение максимальной компоненты тензора магнитоупругих напряжений  $S_{33}$  имеет величину 3,14 МПа. Расчеты показали, что при движении доменной границы под действием этих напряжений участки дислокационных петель между точками закрепления выгибаются. При этом суммарное изменение длины дислокационных петель может достигать 15%. Данное обстоятельство с учетом неполной релаксации дислокационной деформации при выключении поля может быть объяснено данными об увеличении твердости при омагничивании. При этом особая роль отводится гетерогенности структуры, обусловленной наличием парамагнитных карбидных включений в ферритной матрице. В общем случае границы доменов имеют тенденцию проходить через немагнитные или слабомагнитные включения, поскольку энергия границы при нулевой намагниченности минимальна. Наличие большого количества карбидов в быстрорежущей стали делает малой вероятность возвращения границ доменов в исходное положение сразу после выключения внешнего поля, что в свою очередь тормозит релаксацию дислокационной деформации, которая определяется соотношением линейного натяжения, величиной барьера Пайерлса, а также магнитоупругим взаимодействием выгнутых участков дислокационных петель с доменными границами, занимающими новое положение.

Следует также учитывать анизотропию поля смещений атомов железа при магнитоэластической деформации, что приводит к упорядоченному заполнению атомами углерода октаэдрических пустот в о.ц.к. решетке отпущенного и вторичного мартенсита вдоль одного из направлений легкого омагничивания  $\langle 100 \rangle$ , то есть образованию атмосфер Сноэка, что также дает некоторый вклад в упрочнение по твердорастворному механизму.

Обратимость эффекта упрочнения быстрорежущих сталей после омагничивания объясняется стремлением междоменных границ занять энергетически выгодные положения, обусловленные пространственной кристаллографической ориентацией ферромагнитных фаз, которая не меняется в процессе омагничивания. При этом факторы, способствующие частичной деформации дислокационной структуры, устраняются, и твердость снижается до первоначального уровня.

При резании омагниченным инструментом твердость снижается уже через 5-10 минут при работе на оптимальных режимах. Это связано с повышением температуры инструмента при работе и увеличением подвижности атомов, тормозящих перемещение закрепленных участков дислокаций. Известно, что сила торможения, обусловленная примесными атомами, обратно пропорциональна температуре. Таким образом, с повышением температуры условия, способствующие повышению твердости омагниченного инструмента, исчезают, что не дает возможность получить прирост стойкости. Поэтому попытки реализации эффекта Герберта для увеличения стойкости режущего инструмента следует рассматривать, как нонсенс.

#### О СООТНОШЕНИИ КОМПОНЕНТ СВЯЗИ В ПРОВОДНИКАХ, ПОЛУПРОВОДНИКАХ И ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ

Трубачева А.М., Сироткин О.С.

*Казанский Государственный  
энергетический университет,  
Казань*

В литературе приводится много разрозненных данных по свойствам некоторых бинарных соединений [1, 2, 3, 4, 5]. В «Химической энциклопедии» [4, 5] к проводникам приравнивают такие бинарные соединения, как карбиды элементов Fe, Co, Ni, и переходных металлов IV – VII групп, а также CoSb. Цель данной работы – показать, как влияет тип химического взаимодействия на электрическую проводимость соединений.

В таблице 1 приведены некоторые бинарные соединения, по которым в литературе имеются наиболее полные данные. Указанные соединения разбиты на классы по удельному электрическому сопротивлению и ширине запрещенной зоны. Также в таблице 1 приводятся значения степеней ковалентности, металличности и ионности данных гетероядерных соединений. К сожалению, авторам не удалось найти некоторые данные по свойствам бинарных гетероядерных проводников. По этой причине в таблице приведены данные по гомоядерному проводниковому материалу (алюминий).

**Таблица 1.** Значения степеней ковалентности, металличности и ионности некоторых гетероядерных соединений, а также их физико-химические свойства

Связь	характеристика	$C_K$	$C_M$	$C_{II}$	Плотность $\rho$ кг/м <sup>3</sup> [1]	Температура плавления °С [1]	Диэлектрическая проницаемость, $\epsilon$ [1]	Ширина запрещенной зоны при 20 °С, эВ [1, 2]	Подвижность м <sup>2</sup> /(В*с) [1, 2]		Общая характеристика различных материалов [1]	
									электронов	дырок	Удельное электрическое сопротивление, $\rho$	Ширина запрещенной зоны
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
Al	Проводник	44,52	55,48	0,00	2698,90	660,24			0		$10^{-8} - 10^{-5}$ ( $\rho_{Al} = 0,028 \cdot 10^{-6}$ )	0
AlP	полупроводник	48,62	47,51	3,87	2420,00	2550,00	9,80	2,450	0,008	0,003	$10^{-6} - 10^{-8}$	0,05 - 3
GaP		48,40	47,56	4,04	4130,00	1467,00	10,00	2,200	0,019	0,012		
InP		47,92	47,66	4,42	4790,00	1070,00	12,10	1,350	0,460	0,015		
AlAs		48,14	49,29	2,58	3600,00	1750,00	10,90	2,160	0,028	-		
GaAs		47,93	49,35	2,72	5320,00	1238,00	13,80	1,430	0,950	0,045		
InAs		47,48	49,48	3,04	5690,00	943,00	14,55	0,356	3,300	0,046		
AlSb		46,90	52,25	0,85	4220,00	1060,00	11,21	1,620	0,020	0,055		
GaSb		46,72	52,35	0,94	5620,00	712,00	15,69	0,700	0,400	0,140		
InSb		46,32	52,54	1,14	5780,00	525,00	17,72	0,180	7,800	0,075		
SiO	диэлектрик	51,734	22,340	25,926							$10^7 - 10^{17}$	Больше 3

Анализ таблицы 1 показывает, что в ряду фосфидов Al, Ga, In уменьшаются значения  $C_K$ , увеличиваются значения  $C_M$  и  $C_{II}$  и соответственно уменьшаются температуры плавления, ширина запрещенной зоны, а также увеличиваются значения диэлектрической проницаемости и подвижности дырок и электронов. Последнее логично увязывается с увеличением степени металличности и уменьшением ковалентности. Практически аналогичные изменения происходят и в других классах соединений. Так, например, в ряду арсенидов Al, Ga, In уменьшаются значения  $C_K$ , увеличиваются значения  $C_M$  и  $C_{II}$ , уменьшаются температуры плавления, ширины запрещенной зоны, а также увеличивается плотность, диэлектрической проницаемости и подвижности дырок и электронов, последнее связано с увеличением степени металличности. В ряду антимонидов Al, Ga, In уменьшаются значения  $C_K$ , увеличиваются значения  $C_M$  и  $C_{II}$ , уменьшаются температуры плавления, ширины запрещенной зоны, а также происходит увеличение плотности, диэлектрической проницаемости и подвижности электронов, что связано с увеличением  $C_M$ , а подвижность дырок увеличивается от AlSb до элементе GaSb, а затем падает.

Данные приведенные в столбцах (12) и (13) таблицы 1 и литературные данные [4, 5] подтверждаются нашими расчетами. Действительно, различие между классами проводниковых, полупроводниковых и диэлектрических соединений определяется соотношением трех компонент химической связи. В первом классе соединений, представителем которого в таблице 1 является алюминий,  $C_K$  меньше 47% (граничные значения для полупроводников), а  $C_M$  – более 54% (граничные значения для полупроводников). В полупроводниках  $C_K$  и  $C_M$  соизмеримы между собой и значительно преобладают над  $C_{II}$ ,  $C_K$  изменяется от 51,72

до 45,07,  $C_M$  – от 53,54 до 39,85 и  $C_{II}$  – от 12,69 до 0,85. Что касается диэлектриков, представителем класса которых мы выбрали кремнезем, его степень ковалентности составляет 51,74%,  $C_M$  – 22,34 и  $C_{II}$  – 25,93%. Это говорит о том, что чем больше  $C_M$  у соединения, тем более он способен проявлять проводящие свойства и наоборот, у диэлектриков эта характеристика составляет наименьшее значение – 22,34%, а ковалентность – наибольшее. Этим и объясняется их полная неспособность проводить электрический ток.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Колесов С.Н., Колесов И.С. Материаловедение и технология конструкционных материалов. М.: Высшая школа, 2004.
2. Физическая химия силикатов учеб. для ВУ-Зов под ред. чл.-корр. АН УССР А.А. Пашенко. М.: В.Шк. 1986.
3. Скаков Ю.А. Интерметаллиды. Химическая энциклопедия, т 2, М., БРЭ, 1998 с.478 – 486
4. Кислый П.С. Карбиды. Химическая энциклопедия, т 2, М., БРЭ, 1998 с.623 – 625
5. Федоров П.И. Кобальт. Химическая энциклопедия, т 2, М., БРЭ, 1998 с.819 – 822

#### ДИНАМИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНОГО ВРАЩЕНИЯ В НЕКОТОРЫХ СИСТЕМАХ ДИЕНОВОГО ТИПА

Харченко В.И.

*Читинский государственный университет,*

Динамический подход, основанный на концепции гамильтониана реакционного пути, позволяет решать колебательные задачи для полученных срезов поверхности потенциальной энергии основного со-