

Михайлов А.Н., Байков А.В., Дейкун С.А. «Выбор геометрии торцевого эластичного шлифовального инструмента» – В сб. «Прогрессивные технологии и системы машиностроения» – Донецк: ДонГТУ, 2000, вып. 14 – С. 7 – 14. **8.** Рыбицкий В.А. Алмазное шлифование твердых сплавов. – Киев: Наукова думка, 1984 – 224с. **9.** Калафатова Л.П. Технологические основы повышения эффективности обработки и обеспечения качества изделий из технических стекол и ситалов. Автореферат на соискание ученой степени докт. техн. наук – Харьков – 2001. – 37 с. **10.** Польшаков В.І. Теоретичні і практичні основи високопродуктивного торцевого шліфування важкооброблюваних матеріалів. Автореферат дисертації на здобуття вченого ступеня докт. техн. наук. – Київ – 1998. – 33 с. **11.** Михайлов А.Н., Горобец И.А., Байков А.В., Голубов Н.В., Ищенко А.Л. Экспериментальная установка для исследования процессов шлифования изделий из природного камня /Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія: Машинобудування і машинознавство. Вып. 92. – Донецк, ДонНТУ 2005. с. 164 – 174.

Сдано в редакцию 12.05.06

Рекомендовано д.т.н. Бутенко В.И.

МАЛАЯ ГИБРИДИЗАЦИЯ И АЛЛОТРОПИЧЕСКИЕ ИЗМЕНЕНИЯ

Гречихин Л.И.

(Минский государственный высший авиационный колледж, г. Минск, Белоруссия)

«Малая гибридизация влечет большие последствия»

Ч. Коулсон

Power budget formation mechanisms taking into account covalent and ion bond, point dipole-charge and dipole-dipole interaction as applied to C_2 and C_3 , phenol graphite, fullerenes, nanotubes and diamond molecules are considered. It is shown that phenol graphite is generated mainly in consequence of $C_2 - C_2$ molecules interaction, fullerenes - in consequence of interaction between C_3 molecules and carbon atoms, nanotubes - in consequence of $C_3 - C_2$ interaction and diamond - in consequence of $C_3 - C_3$ interaction.

Введение. Область применения веществ четвертой группы таблицы Менделеева углерода, кремния, германия, олова весьма многообразная. Особая значимость в этом отношении принадлежит углероду. Это организация сухого трения [1]; использование фенольного графита в качестве теплозащитного покрытия в спускаемых аппаратах искусственных спутников Земли [2]; металл-фуллеренов – в качестве сорбционных датчиков, покрытий с низким коэффициентом трения, тензорезистивных датчиков, в медицине, в измерительной технике и др. [3]; нанотрубок – энергетике для улучшения характеристик источников энергии [4] и, наконец, алмазов – в машиностроении в качестве абразивного и режущего инструмента [1]. В каждом конкретном случае используется разнообразное аллотропическое изменение углерода. Экспериментально хорошо изучены кристаллографические структуры при аллотропическом изменении различных веществ и физико-химические свойства таких структур. Но при этом отсутствуют адекватные модели, которые бы позволили правильно обосновывать технологию получения того или иного вещества в заданном структурном состоянии. Были попытки сформировать такие модели путем применения одночастичной квантовой теории твердого тела и молекулярной динамики. Однако ни первая ни вторая теории не позволили получить однозначных решений. Это обусловлено тем, что одночастичная квантовая теория твердого тела не верна в своей по-

становке задачи, а вторая теория – чисто эмпирическая, так как в основе ее используется эмпирический потенциал Леннарда-Джонса [5].

Аллотропические изменения трактуются, как фазовый переход второго рода. Такой подход позволил правильно обосновать условия, в которых происходит такой переход в металлах [6]. Применительно к веществам четвертой группы таблицы Менделеева получение той или иной структуры не ясно, почему происходит трансформации одной структуры в другую под влиянием изменения внешних воздействующих факторов, и когда в каких условиях формируется та или иная структура. Переход одной структуры в другую при изменении внешних физико-химических факторов происходит путем применения сложных технологий. В этой связи рассмотрим каким образом возникают различные структуры основе анализа строения атомов и простейших молекул с образованием кластерных структур и межкластерного взаимодействия.

Целью работы является анализ различных аллотропических изменений на основе квантовомеханического метода расчета энергий связи, обусловленной ковалентной и ионной связями с учетом электрон-дипольного и диполь-дипольного взаимодействия. Для достижения поставленной задачи необходимо решить следующие основные задачи: разработать математический аппарат расчета результирующей энергии связи бинарного взаимодействия для компьютерного моделирования кластерных образований в различных аллотропических состояниях; обосновать каким образом формируются кластерные решеточные структуры в различных аллотропических состояниях.

Строение атомов углерода, кремния, германия, олова. Атом углерода содержит 6-ть электронов, которые образуют оболочки вида: $1s^2, 2s^2$ и $2p^2$. Атом кремния обладает следующей электронной структурой: $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^2$. Аналогично германий – оболочками вида $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^{10}, 4s^2, 4p^2$ и олова – оболочками $1s^2, 2s^2, 2p^2, 3s^2, 3p^6, 3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 4d^{10}, 5s^2, 5p^2$. Исходные данные указанных атомов, которые использовались в расчетах, приведены в табл. 1. Волновые функции, которые описывают состояния электронов в сложных атомных системах, были предложены Слэтером в 1940 г. [7]. Применяя эти волновые функции можно получить средние удаления электронов, находящихся в различных оболочках. Результаты расчетов приведены в табл. 1.

Таблица 1. Исходные данные, на основании которых производился расчет

Вещества	Потенциал первой, второй и третьей кратности ионизации, εB			Среднее удаление электрона от ядра первой, второй и третьей кратности ионизации, A			Эффективный заряд ядра первой, второй и третьей кратности ионизации			Среднее смещение электронного облака от центра атома, A	Дипольный электрический момент, D
	θ_1	θ_2	θ_3	$r_{p,1}$	$r_{p,2}$	r_s	Z_1^*	Z_2^*	Z_3^*		
C_I	11,26	24,4	47,9	0,92	0,84	0,76	0,72	1,32	2,41	0,386	1,81
Si	8,15	16,3	33,5	1,47	1,36	1,26	0,83	1,54	2,93	0,594	2,74
Ge	7,90	15,9	34,2	1,54	1,45	1,37	0,841	1,59	3,24	0,551	2,31
Sn	7,34	14,6	30,5	1,74	1,64	1,55	0,885	1,66	3,27	0,820	2,085

Средние удаления от ядра атомов указанных веществ электронов s -состояния и p -состояния разные, и поэтому их волновые функции взаимно перекрываются. Вследствие этого происходит гибридизация волновых функций s и p состояний [8] Результирующая волновая функция является суперпозицией волновых функций этих состояний. С учетом нормировки имеем:

$$\psi = \frac{1}{2}(C_1\psi_{2s} + C_2\psi_{2p}),$$

(1)

где,

$$\psi_{2S} = Ar_{2S} \exp(-\alpha r_{2S}) \quad \text{и} \quad \psi_{2P} = Ar_{2P} \exp(-\beta r_{2P}).$$

Здесь в свою очередь:

$$\alpha = \frac{Z_{2S}^*}{n^* a_0}; \quad \beta = \frac{Z_{2P}^*}{n^* a_0};$$

A – нормировочный множитель; и $a_0 = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ – радиус первой орбиты атома водорода.

Волновая функция (1) является гибридной. Гибридизация волновых функций приводит к взаимному смещению относительно ядра атома сферически симметричных S и P состояний. В результате возникает внутри атома встроенный дипольный электрический момент. Смещение валентных электронов относительно ядра атома определяется по формуле [9]:

$$\bar{x} = \iint x |\psi|^2 d\tau_1 d\tau_2. \quad (2)$$

Расчет интеграла (2) применительно к атому углерода был выполнен Коулсоном и составил $0,89a_0$. Этому значению смещения соответствует дипольный электрический момент $p_D = 2,2 D$ (Дебая) [9] (e – заряд электрона). Это достаточно большая величина встроенного дипольного электрического момента атома углерода. Его влияние на энергетику образования различных аллотропических состояний углеродных веществ является существенным. Поэтому для уточнения полученного значения Ч. Коулсоном встроенного электрического дипольного момента атома углерода рассмотрим процесс его образования с несколько других позиций.

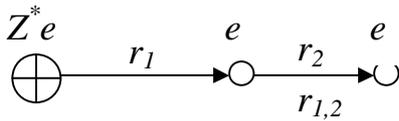


Рис. 1. Расположение валентных электронов разных состояний относительно ядра атома

На рис. 1 приведена схема расположения валентных электронов в заданной оболочке в разных энергетических состояниях. Приравнивая центростремительную силу, обусловленную законом Кулона, центробежной силе для обоих электронов с учетом их взаимного отталкивания получаем следующее значение квадрата смещения:

$$\bar{x}^2 = \frac{Z_1^* e^2}{m_e v_1^2} \cdot \frac{Z_2^*}{m_e v_2^2} \cdot \frac{r_{1,2}^2}{r_1 r_2} = \bar{r}_1 \bar{r}_2 \frac{r_{1,2}^2}{r_1 r_2}. \quad (3)$$

Полученное значение усредним по всему объему конфигурационного пространства электронного облака первого и второго электронов, а именно:

$$\bar{x}^2 = \frac{1}{4} \bar{r}_1 \bar{r}_2 (A_1 A_2)^{1/2} \iint \frac{r_{1,2}^2}{r_1 r_2} |\psi_{2S}|^2 |\psi_{2P}|^2 d\tau_1 d\tau_2. \quad (4)$$

В интеграле (4) следует учитывать только перекрестное значение волновых функций, так как взаимодействие электрона с самим собой не дает его смещения относительно центра атома. Тогда в случае одного силового центра получаем [10]:

$$\bar{x}^2 = 384 \bar{r}_1 \bar{r}_2 C_1 C_2 \alpha^4 \beta^4 \left(\frac{1}{\alpha^5 \beta^3} + \frac{1}{\alpha^3 \beta^5} \right) \quad (5)$$

Полученные значения смещения электронных оболочек от центра атома и соответствующие им электрические диполи приведены в табл. 1. Вычисления выполненные для углерода достаточно хорошо коррелируют с расчетом Коулсона [9].

С учетом наличия в атомах встроенного дипольного электрического момента сравнительно большой величины вследствие гибридизации состояний валентных электронов уточним структуру и энергию связи молекул C_2 , Si_2 , Ge_2 , и Sn_2 .

Образование двухатомных молекул. Известные исходные данные по молекулам использованы те, которые приведены в справочник [11,12]. Расчет ковалентной и доли ионной связям производился с применением волновых функций Слэтера. Ковалентная связь рассчитывалась по формуле, которая получена автором [5] в рамках разработки двухчастичной квантовой механики твердого тела:

$$E_{КОВ} = \left\{ \sum_{i=1}^3 N_i \kappa_i^2 \left[\sum_{k=0}^3 \sum_{l=0}^3 Z_{a,k}^* Z_{b,l} \int_{(a)} \int_{(b)} \rho_{e,a}(\varepsilon_k) \rho_{e,l}(\varepsilon_l) \left(\frac{H_{1,1} + H_{1,2}}{1+S} \right) d\varepsilon_k d\varepsilon_l \right] \right\} \cdot \quad (6)$$

Здесь суммирование ведется по первой, второй и третьей кратностям ионизации с учетом распределение плотности валентных электронов по энергиям и выполнения расчетов с разными эффективными главными квантовыми числами в процессе вычислений кулоновского ($H_{1,1}$) обменного ($H_{1,2}$) интегралов, а также интеграла перекрытия (S); N_i – количество частиц в i -м координационном слое и κ – коэффициент видности, который определен в [5].

Доля ионной связи определялась по формуле [5]:

$$E_{ИОН} = PS \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 R}, \quad (7)$$

где P – вероятность пребывания одновременно двух валентных электронов вблизи одного из взаимодействующих атомов, S – интеграл перекрытия, R – расстояние между взаимодействующими атомами.

Каждый валентный электрон взаимодействует со встроенным электрическим диполем противоположного атома. Этот вид взаимодействия оценивался по формуле [5]:

$$E_{e-d} = 2(1-S) \frac{eP_{\Delta}}{4\pi\varepsilon_0 R}. \quad (8)$$

Диполь-дипольное взаимодействие оценивалось с учетом структуры конденсированной фазы, а именно [5]

$$E_{d-d} = \frac{P_{\Delta,1} P_{\Delta,2} \varphi(\alpha_i, N_i)}{4\pi\varepsilon_0 R_i^3}, \quad (9)$$

Здесь $\varphi(\alpha_i, N_i)$ – структурный множитель.

Таблица 2. Формирование энергий диссоциации Двухатомных молекул четвертой группы таблицы Менделеева

Параметры	Молекулы			
	C_2	Si_2	Ge_2	Sn_2
$E_{КОВ}$	10,316	2,895	2,195	1,693
$E_{ИОН}$	2,127	0,255	0,171	0,122
E_{e-d}	3,522	-	-	-
E_{d-d}	2,137	0,827	0,615	0,366
$E_{рез}$	6,784/6,2	3,921/3,4	2,981/2,8	2,181/2,0

Так как расстояние между ядрами во всех рассмотренных молекулах достаточно малое, то ковалентная связь совместно с долей ионной связи реализуются значительные (табл. 2). При этом во всех молекулах возникает только σ -связь. Значительное обменное взаимодействие для молекулы C_2 обладает максимальным значением, когда деформиро-

ванные орбиты валентных электронов вследствие явления гибридизации расположатся вдоль линии связи взаимно противоположно. В этом случае встроенные электрические диполи расположатся друг против друга своими отрицательными зарядами. Энергия взаимодействия такого расположения диполей положительная, и должна ослаблять результирующую энергию связи, обусловленную ковалентной и ионной связями. В этом случае электрон-дипольное взаимодействие также ослабляет результирующую энергию связи. Для остальных молекул встроенные электрические диполи располагаются друг за другом. При таком расположении диполей электрон-дипольные взаимодействия взаимно компенсируются, а диполь-дипольное взаимодействие упрочняет ковалентную и ионную связи. Результаты вычислений по (6)-(9) приведены в табл.2. Результирующая энергия связи соответствует энергии диссоциации. Совпадение расчетных значений с экспериментальными данными [11] в пределах ошибок измерений и расчетов свидетельствует о правильности предложенной физической модели образования рассмотренных двухатомных молекул.

Углерод представляет особый интерес, т. к. обладает широким спектром аллотропических превращений. Поэтому на этом примере выясним причину возникновения аллотропических превращений, которые свойственны не только углероду, но и другим чистым и композиционным веществам.

Образование молекулы C_3 . На рис. 2 показана схема взаимодействия атома углерода с молекулой C_2 (на рис. 2 выделена пунктирной линией). Молекула C_3 образуется вследствие взаимодействия атома углерода с молекулой C_2 . Минимум потенциальной энергии взаимодействия реализуется так, как это показано на рис. 2. В таком расположении атомов включаются электрон-дипольное и диполь-дипольное взаимодействия, а ковалентная и доля ионной связи также имеют достаточно большое значение.

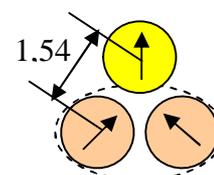


Рис. 2. Общий вид молекулы C_3

Взаимодействие атома углерода с молекулой C_2 приводит к обобщению всех трех атомов в единую молекулу C_3 . При этом молекула C_2 деформируется так, что расстояние между атомами в этой молекуле возрастает от 1,242 А до 1,540 А. На это тратится работа, равная 1,787 эВ. Поэтому в результирующей энергии связи атома углерода с молекулой C_2 это значение работы учитывается как положительная величина, т.е. приводит к ее ослаблению. Так как происходит существенная деформация молекулы C_2 , то это неизбежно сказывается на расположении электрических диполей исходных атомов. Чтобы обеспечить максимальную энергию диполь-дипольного взаимодействия, необходимо их расположить так, как это показано на рис. 2. Учет всех возможных типов взаимодействий в системе $C_2 - C$ позволил установить, что общая энергия разрыва связи $C_2 - C$ составляет 6,383 эВ. Энергия ионизации молекулы C_3 составляет 11,5 эВ, а средний ее радиус – 1,584 А.

Таблица 3. Результаты расчета всех видов связи для углерода в различных аллотропических состояниях.

Вещество	Энергия связи, эВ				Результирующая	$E_{\partial-\partial}/E_{рез}$
	ков.	ион.	$e-\partial$	$\partial-\partial$		
C_2	-6,573	-2,127	-1,210	+3,536	-6,374	-0,55
$C_2 - C \rightarrow C_3$	-2,118	-2,576	-1,870	-1,606	-6,383	0,25
$C_2 - C_2$ в слое	-1,209	-0,005	-0,162	-2,496	-1,855	1,346
$C_2 - C_2$ между слоями слой под слоем	-0,025	-0,022	-0,003	+0,232	+0,182	1,275
	-0,025	-0,022	-0,003	-0,240	-0,290	0,83
$C_3 - C$ 5-ть атомов	-0,613	-0,158	-2,295	-1,854	-4,841	0,38
$C_3 - C$ 8-мь атомов	-0,613	-0,158	-3,040	-1,255	-4,664	0,27
$C_3 - C_2$	-0,267	-0,102	-0,930	-0,927	-2,226	0,42
$C_3 - C_3$	-1,094	-0,040	-1,472	-7,42	-10,026	0,74

Взаимодействие молекул $C_2 - C_2$. На рис. 3 показано строение вещества, которое обусловлено взаимодействием $C_2 - C_2$, в заданной плоскости. Такое расположение молекул C_2 относительно друг друга приводит к их растяжению. Расстояние между атомами внутри молекулы возрастает с 1,242 А до 1,415 А [8]. На это тратится работа равная 2,017 эВ. Расчет, выполненный по (6)-(9), приведен в табл. 3. Результирующая энергия связи молекул C_2 в плоском слое, как это показано на рис. 3, равна 1,855 эВ. Энергия связи при этом формируется преимущественно диполь-дипольным взаимодействием. Расстояние между слоями составляет 3,35 А. Если подслои размещаются со сдвигом так, что молекулы C_2 находятся по центру шестиугольника, то результирующая энергия связи будет положительной и составит 0,182 эВ. Если же сместить подслой вправо или влево от центра шестиугольника, то энергия связи уже составит 0,290 эВ. Получается, что даже незначительные сдвиговые деформации приводят к самопроизвольному расслоению такого материала. Таким свойством обладает графит [8]. Следовательно, взаимодействие молекул $C_2 - C_2$ формирует графит.

Уголь обладает нитевидной структурой. Энергия связи молекул C_2 между собой в этом аллотропическом состоянии составляет $\sim 2,3$ эВ, а между нитями определяется только ковалентной связью и обладает значением $\sim 1,21$ эВ.

Взаимодействие $C_3 - C$. При взаимодействии атомов углерода с молекулой C_3 происходит постепенное наращивание вокруг молекулы C_3 атомов углерода, образуя при этом замкнутую конфигурацию из 5-и, 8-и, 34-х и т.д. устойчивых конфигураций типа кластеров. Что собой представляют эти конфигурации показано на рис. 4.

Когда в молекуле C_3 сверху и снизу располагается атом углерода, то возникает устойчивая конфигурация из 5-и атомов. Энергия связи атома углерода с молекулой C_3 составит 4,831 эВ. В табл. 3 приведены расчетные значения энергий связи при различных взаимодействиях. Расстояние между взаимодействующими центрами C_3 и C составляет 2,354 А. При расчетах электрон-дипольного и диполь-дипольного взаимодействия расстояние между частицами использовалось 1,54 А. Между атомами углерода диполь-дипольное взаимодействие составляет 0,178 эВ. Это взаимодействие ослабляет результирующую энергию связи. Результирующая энергия связи значительная и обусловлена в основном электрон-дипольным и диполь-дипольным взаимодействием.

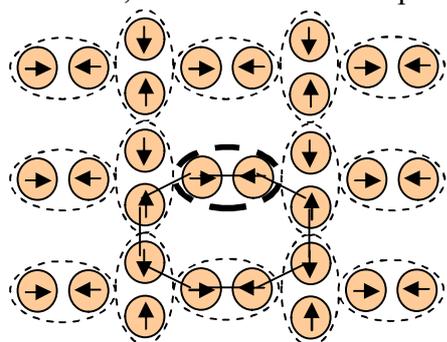


Рис. 3. Фрагмент строения вещества при взаимодействии молекул $C_2 - C_2$.

Когда формируется кластер из 8-ми атомов, то минимальная энергия связи следующего слоя атомов углерода с кластером составляет 4,664 эВ. Конкретный расчет различных типов взаимодействий представлен в табл. 3. По существу энергия связи атомов углерода непосредственно с молекулой C_3 существенно не отличаются друг от друга в зависимости от их расположения в различных слоях относительно молекулы C_3 . Так как энергия связи атомов углерода с молекулой C_3 весьма значительная,

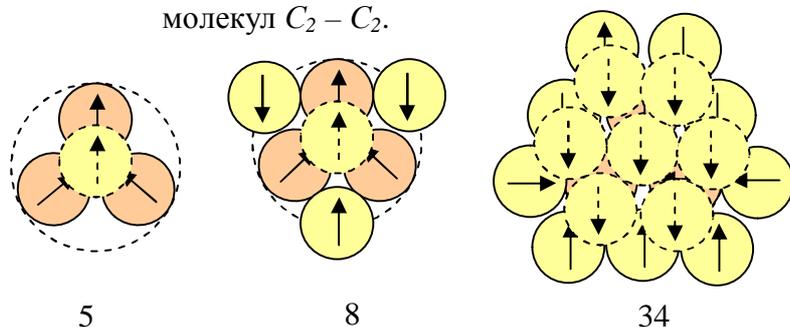


Рис.4. Оптимальное число частиц и их расположение в фуллерене

Когда формируется кластер из 8-ми атомов, то минимальная энергия связи следующего слоя атомов углерода с кластером составляет 4,664 эВ. Конкретный расчет различных типов взаимодействий представлен в табл. 3. По существу энергия связи атомов углерода непосредственно с молекулой C_3 существенно не отличаются друг от друга в зависимости от их расположения в различных слоях относительно молекулы C_3 . Так как энергия связи атомов углерода с молекулой C_3 весьма значительная,

то происходит обобщение валентных электронов и возникает кластер с количеством частиц, определяемых числом Фибоначчи. Последующие атомы углерода взаимодействуют с кластером, размер которого значительно возрос. Поэтому ковалентной и ионной связями можно пренебречь и рассматривать только взаимодействие электрон-диполь и диполь-дипольное. Каждый атом углерода своими диполями взаимодействует одновременно с тремя атомами углерода, расстояние между которыми $1,54 \text{ \AA}$. Расположение дипольных электрических моментов показано на рис. 4. Результирующая энергия связи для каждого атома углерода последующего слоя составляет $\sim 4,15 \text{ эВ}$.

Итак, энергия связи атомов углерода независимо от того, в каком слое они находятся, составляет более 4 эВ на атом. Каждый полностью заполненный слой представляет собой макромолекулу с обобщением валентных электронов. Образующиеся таким образом частицы получили название фуллерены. Это достаточно прочные образования кластерных макромолекул. Теперь рассмотрим какое вещество формируется в результате взаимодействия молекул C_3 и C_2 .

Взаимодействие $C_3 - C_2$. Общая схема расположения молекул C_2 относительно молекулы C_3 приведена на рис. 5. Расстояние между центрами молекул C_2 и C_3 равно $2,664 \text{ \AA}$. Выполненный расчет ковалентной и доли ионной связей приведен в табл. 2. Из рис. 5 видно, что наличие в центре кластерного образования молекулы C_3 приводит к возникновению отростков из молекул C_2 (нижняя часть рис. 5), которые взаимно отталкиваются друг от друга. Дальнейший их рост приводит к замкнутой структуре, изображенной на рис. 3.

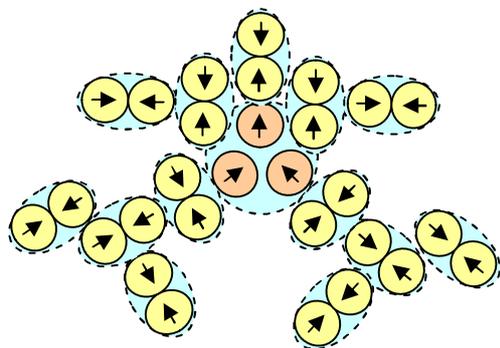


Рис. 5. Схематическое изображение формирования нанотрубок

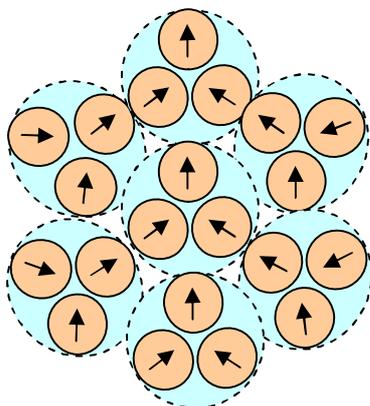


Рис. 6. Расположение молекул C_3 в слое в процессе их взаимодействия

3. Внутри такой структуры образуется пустота, размер которой может составлять десятки нанометров. Нарастивание слоев, изображенных на рис. 5, приводит к формированию нанотрубок.

Взаимодействие $C_3 - C_3$. Характер расположения молекул C_3 в слое показан на рис. 6. Такое их расположение формирует гранцентрированную кубическую структуру с расстоянием между атомами $1,54 \text{ \AA}$, как это реализуется в молекуле C_3 . Каждая молекула C_3 в ближайшем окружении содержит 12 таких молекул. Ковалентная связь между ними определяется обменным взаимодействием (в основном σ -связь) с энергией ионизации $11,5 \text{ эВ}$. Величина ковалентной связи и энергия других типов взаимодействий приведены в табл. 2.

Молекулы C_3 располагаются снизу и сверху относительно слоя, изображенного на рис. 6 и образуют свою кубическую структуру, которая сдвинута относительно исходной кубической структуры на половину ее грани. Возникает алмазная структура. Энергия связи преимущественно определяется диполь-дипольным взаимодействием. Поэтому алмазная структура углерода обладает хрупким разрушением, что и подтверждается экспериментом.

Выводы: В атоме углерода вследствие гибридизации s и p состояний возникает встроенный дипольный электрический момент. При образовании молекулы C_2 встроенные электрические моменты направлены взаимно противоположно, ослабляя ковалентную связь и долю ионной связи. Энергия разрыва связи $C_2 - C$ определяется всеми возможными типами взаимодействия и составляет $6,38$

эВ. Взаимодействие молекул $C_2 - C_2$ в слое и между слоями определяется ковалентной связью и диполь-дипольным взаимодействием, но между слоями возникает неустойчивое равновесие, что и определяет структуру графита. Уголь представляет собой нитевидную структуру, которая определяется взаимодействием $C_2 - C_2$, сдвинутых относительно друг друга на величину атома углерода. Взаимодействие $C_3 - C$ определяет структуру фуллеренов, взаимодействие $C_3 - C_2$ – структуру нанотрубок и, наконец, взаимодействие $C_3 - C_3$ – структуру алмаза.

Список литературы: 1. Витязь П.А. Наноструктурные материалы и перспективы их применения //III международный научный семинар «Наноструктурные материалы – 2004 Беларусь-Россия». – Мн.: ИТМО НАН Беларуси, 2004. С. 7-9. 2. Huber P.V., Evans J.S., Schexnayder Jr. C.J. Comparison of Theoretical and Flight-Measured Ionization in a Blunt Body Re-Entry Flowfield //AIAA Journal, 1971, V. 9, №6. P. 1154-1182. 3. Шпилевский Э.М. Металл-фуллереновые материалы и структуры //XI Международная научно-техническая конференция «Высокие технологии в промышленности России» 8-10 сентября 2005 г. Москва. – М.: ОАО «Техномаш», 2005. С. 122-130. 4. Дворкин В.В., Дзбановский Н.Н., Кривченко В.А. и др. Исследование углеродных нанотрубок, полученных методом гидролиза //XI Международная научно-техническая конференция «Высокие технологии в промышленности России» 8-10 сентября 2005 г. Москва. – М.: ОАО «Техномаш», 2005. С. 144-148. 5. Гречихин Л.И. Физика наночастиц и нанотехнологий. – Мн.: УП «Технопринт», 2004. – 399 с. 6. Гречихин Л.И. Энергия связи и фазовые переходы в металлах //Сб. трудов IX Международной научно-технической конференции «Машиностроение и техносфера XXI века» 9-15 сентября 2002 г. Севастополь-Донецк. – Донецк: ДонНТУ, 2002, Т. 1. С. 138-146. 7. Slater J.C. Wave Functions in a Periodic Potential // Phys. Rev. 1937, V. 51, №10. P. 846-851. 8. Глинка Н.Л. Общая химия: Учебное пособие для вузов /Под ред. В.А. Рабиновича. – Л.: Химия, 1983. – 704 с. 9. Коулсон Ч. Валентность. – М.: Мир, 1965. – 426 с. 10. Гомбаш П. Проблема многих частиц в квантовой механике. –М.: Изд.-во Иностранной литературы, 1952. – 279 с. 11. Радциг Ф.Ф., Смирнов Б.М. Справочник по атомной и молекулярной физике. – М.: Атомиздат, 1980. – 240 с. 12. Братцев В.Ф. Таблицы атомных волновых функций – М.-Л.: Наука, 1966. – 192 с.

Сдано в редакцию 5.05.06
Рекомендовано д.т.н., проф. Бухач А.

НЕПРЕРЫВНЫЙ АВТОМАТИЧЕСКИЙ КОНТРОЛЬ НАДЕЖНОСТИ И ДОЛГОВЕЧНОСТИ ОТДЕЛЬНЫХ КОНСТРУКЦИЙ В СЛОЖНОЙ МЕХАНИЧЕСКОЙ СИСТЕМЕ

Гречихин Л. И., Шумский И. П. (МГВАК, ООО «Регула», г. Минск, Беларусь)

Dynamic of behavior of separate grains in polycrystalline structural material under mechanical and heat loading is a matter of the article. The general algorithm of correct decision making about the outage beginning for each component under control is analyzed. The description of automatic system for the reliability and durability control of the constructions in the complicated mechanical system using the artificial neuronal net is given.

В настоящее время в машиностроении возникла острая необходимость в непрерывном контроле надежности и возможной дальнейшей эксплуатации, как отдельных лу.