

- [3] Shimono, M. Molecular Dynamics Study on Formation and Crystallization of Ti-Al Amorphous Alloys / M. Shimono, H. Onodera // Mat. Sci. Engin. A. – 2001. – V.304-306. – P. 515–519.
- [4] Wendt, H. R. Empirical Criterion for the Glass Transition Region Based on Monte Carlo Simulations / H. R. Wendt, F. F. Abraham // Phys. Rev. Lett. – 1978. – V.41. – P. 1244.
- [5] Zhang, J.-P. Size effect in the melting and freezing behaviors of Al/Ti core-shell nanoparticles using molecular dynamics simulations / J.-P. Zhang, Y.-Y. Zhang, E.-P. Wang, C.-M. Tang, X.-L. Cheng, Q.-H. Zhang // Chinese Physics B. – 2016. – V.25, No.3. – P. 036102.

МАРТЕНСИТНЫЕ ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И СЛАБОУСТОЙЧИВЫЕ СОСТОЯНИЯ В СПЛАВАХ НА ОСНОВЕ TiNi С СЕРЕБРОМ

**Г.А. Байгонакова^{*}, Е.С. Марченко, А.И. Потекаев,
А.А. Клопотов**

*Национальный исследовательский Томский государственный
университет, г. Томск, ^{*}gat27@mail.ru*

Сплавы на основе TiNi активно изучаются из-за комплекса физико-механических свойств, прежде всего, способности возврата больших деформаций при термическом или механическом воздействиях [1]. Ключевыми особенностями этих сплавов являются термоупругие мартенситные превращения (МП) [2] и слабуюстойчивые состояние вблизи границы потери устойчивости [3]. Цель – экспериментально исследовать влияние легирования Ag на область слабуюстойчивых состояний и характеристики мартенситных превращений сплавов на основе TiNi.

Температурные зависимости удельного электросопротивления позволили качественно оценить тип МП $B2 \rightarrow R \rightarrow B19'$, влияние на область слабуюстойчивых состояний и определить характеристические температуры МП в статическом состоянии. По диаграмме МП в зависимости от концентрации Ag можно выделить две области изменения характеристических температур МП. Одна область соответствует понижению характеристических температур МП, в которой легирование до 0.5 ат.% Ag стабилизирует высокотемпературную B2-структуру и способствует понижению интервала МП (слабуюстойчивых состояний). В другой области более высокие концентрации Ag (1, 1.5 ат.%) повышают температуры МП и смещают $B2 \leftrightarrow R \leftrightarrow B19'$ (слабуюстойчивые состояния) к более высоким температурам. Такой характер поведения МП связан с изменением структурно-фазового слабуюстойчивого состояния и перераспределением элементов в матрице, вызванным введением Ag.

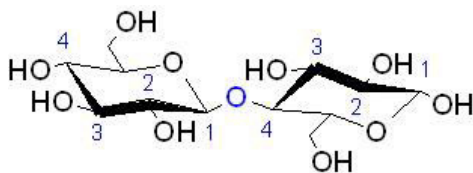
- [1] Otsuka, K. Physical metallurgy of Ti–Ni-based shape memory alloys / K. Otsuka, X. Ren // Progress in Materials Science. – 2005. – V.511, Iss.50. – P. 511–678.
- [2] Марченко, Е. С. Влияние серебра на структуру и эффекты памяти формы биосовместимых сплавов на основе TiNi / Е. С. Марченко, Г. А. Байгонакова, В. Э. Гюнтер // ПЖТФ. – 2018. – Т.44, №16. – С. 96–103.
- [3] Потекаев, А. И. Слабоустойчивые предпереходные структуры в никелиде титана / А. И. Потекаев, А. А. Клопотов, Э. В. Козлов, В. В. Кулагина. – Томск: Изд-во НТЛ, 2004. – 296 с.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГИИ СОСТОЯНИЯ ЦЕЛЛОБИОЗНОГО ЗВЕНА. МЕХАНОХИМИЧЕСКОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ

С.Г. Мамылов

*Институт химии твердого тела СО РАН, г. Новосибирск
mamyllov@solid.nsc.ru*

Вопросам организации структуры природных полисахаридов уделяется особое внимание. Природные полисахариды построены из отдельных моносахаридных звеньев, каждое из которых, в свою очередь, способно соединяться с другими звеньями большим числом комбинаций. Ранее обсуждалось моделирование природных полифенольных соединений с моносахаридами [1] и с кремнием [2] с точки зрения образования энергетически выгодных структур. Выполнено моделирование структур дисахаридов, в том числе образованных глюкозными (глюкопиранозными) остатками. Вызывает интерес образование структуры начального звена целлюлозы. Элементарное звено целлюлозы есть дисахарид целлобиоза, встречающийся в природе как самостоятельное соединение и как продукт расщепления целлюлозы. Заметную роль в



переработке природных полисахаридов играет механохимическая активация.

В структуре целлобиозы (рис.) особую роль играет гликозидная связь – мостиковый атом кислорода между 1 и 4 атомами углерода. Методами квантовой механики, молекулярной механики/молекулярной динамики моделировалась энергия состояния молекулы целлобиозы. Получено, что торсионный угол между пиранозными циклами отличается от угла в целлюлозе. Затем вводился в рас-