

## Визначення впливу внутрішніх енергій кристалічної решітки на отримання наноструктур у поверхневих шарах алюмінієвих сплавів

*Національний аерокосмічний університет ім. М. Є. Жуковського  
«Харківський авіаційний інститут»*

У роботі наведені результати розрахунків енергії кристалізації та досліджено її вплив на розмір наноструктурного зерна при іонно-плазмовій обробці алюмінію (ВД17) іонами кисню та азоту. Для вирішення цього завдання ми використовуємо модель, яка була запропонована раніше, де розглядався вплив енергії іонів на теплопровідність та термоджестність в області їх дії. Для цього спочатку ми оцінюємо потенційну кількість частинок у наноструктурі. Потім обчислюємо енергію для атомізації зерна з атомів і хімічних сполук. Знаходячи загальну енергію атомізації зерна ( $E_{ac}$ ), ми визначаємо необхідну енергію для його утворення ( $E_c = 1,1E_{ac}$ ). Ця енергія дозволяє визначити всі характеристики в області дії іона, такі як температура, швидкість зростання температури, температурні напруги, швидкість деформації, розмір зерна, обсяг та глибина наноструктури, а також реальну кількість частинок у наноструктурі. В результаті проведених розрахунків показано, що енергія кристалізації збільшує енергію іонів необхідну для отримання наноструктур. При енергіях іонів близько 300 еВ енергією кристалізації від 0,1 до 7 еВ, можна знехтувати. Тоді при енергіях близьких до  $1,6 \cdot 10^4$  еВ енергія кристалізації має значення від  $2,1 \cdot 10^2$  до  $1,2 \cdot 10^4$  еВ причому енергія для іонів кисню більша. Також розрахунки показали, що заряд іонів суттєво впливає на енергію кристалізації, а саме, для великих зарядів іонів вона збільшується. Все це говорить, що необхідно враховувати енергію кристалізації тільки при енергіях  $2 \cdot 10^3 - 2 \cdot 10^4$  еВ, що дозволяє скорегувати технологічні параметри іонно-плазмової обробки алюмінієвих сплавів для збільшення вірогідності отримання наноструктур. У свою чергу, можливість визначення розмірів наноструктур дозволяє прогнозувати фізико-механічні характеристики поверхневих шарів оброблювальних матеріалів. Ці дослідження можуть бути цікаві фахівцям, що займаються зміцненням поверхонь алюмінієвих сплавів та подальшими дослідженнями наноструктур.

**Ключові слова:** наноструктури, іонно-плазмова обробка, температура, енергія іонів, тепловий потік, алюмінієвий сплав, технологічні параметри.

### Вступ

У сучасному виробництві авіаційної техніки та машинобудуванні широко використовуються алюмінієві сплави [1]. З одного боку, це дозволяє значно зменшити вагу деталей [2] з іншого втрачається їхнє використання із-за низьких фізико-механічних характеристик алюмінієвих сплавів [3]. Для поліпшення властивостей деталей з алюмінієвих сплавів використовуються різні методи [4,5], такі як додавання домішок до відомих сплавів, щоб отримати матеріали з потрібними характеристиками [3,6], або застосовується модифікація поверхневих шарів найпоширеніших сплавів. У порівнянні з розробкою нових алюмінієвих сплавів [2], удосконалення поверхні цих сплавів [4,7] вважається більш перспективною та менше витратною стратегією. На сьогоднішній день існує багато методів модифікації поверхневих шарів алюмінієвих сплавів, таких як радіочастотне наплення [8], мікродугове окиснення [9], ультразвукова [10] або іонно-плазмова [11] обробки. Однак, у сучасних вчених інтерес наукових

досліджень більш зосереджений на використанні наноструктур для формування різноманітних покриттів на алюмінієвих сплавах [12]. Наноструктурні покриття дозволяють не лише значно покращити фізико-механічні характеристики алюмінієвих сплавів, такі як зносостійкість [13], втомна міцність [14], опір ударному навантаженню [10], але й надати нові цікаві властивості, такі як підвищена корозійна стійкість [12], супергідрофобні [14] та антиобмерзальні властивості [15], радіаційна стійкість [11, 15] та інші. Тому сміливо будемо стверджувати, що алюмінієві сплави, завдяки їхній низькій вазі та високим фізико-механічним властивостям, які забезпечуються покриттями з наноструктурами, будуть широко використовуватися не лише в авіаційній техніці, а й у машинобудуванні, зокрема в автомобільній [1,16] та суднобудівній [17,18] промисловості.

## 1. Теоретична частина

Отримання наноструктур на поверхнях конструкційних матеріалів є предметом значної уваги серед сучасних досліджень [19,20]. Хоча дослідження стосовно сталевих сплавів вже ведуться досить активно [20, 21], а роботи, присвячені алюмінієвим матеріалам, залишаються менш численними. Наприклад, у [8] досліджено утворення нанопокриттів на алюмінієвих та титанових поверхнях за допомогою методу мікродугового оксидування у водних розчинах. Отримані покриття відзначилися високою однорідністю і пористістю, а також мали високий коефіцієнт поглинання електромагнітного випромінювання у терагерцовому діапазоні (до 70 %), що є дуже цікавим для подальшого розвитку стелс-технологій. Крім того, були розглянуті параметри анодного синтезу нанопористих плівок на основі анодного оксиду алюмінію (АОА) [22], що підкреслило важливість попередньої обробки підкладки та напруження під час обробки. Були також проведені дослідження стійкості наноструктурованих покриттів на основі наночасток політетрафторетилену на пористих алюмінієвих сплавах [10].

Як бачимо з вище наведеного, отримання наноструктур на алюмінієвих сплавах значно більше досліджують експериментально [8, 10, 22] та менше теоретично [23]. Також мало уваги приділяють використанню іонізуючого випромінювання для отримання наноструктур в алюмінієвих сплавах, хоча для сталевих проводились досить ретельні дослідження [24,25]. У [24, 26] було показано, що в якості джерела іонізуючого випромінювання, доцільно взяти лазерне випромінювання, а у [27] було проведено дослідження полів температур та температурних напружень у зоні діючого випромінювання за представленою раніше моделлю [23, 24]. В результаті теоретичного дослідження формування наноструктур у поверхневому шарі алюмінієвого сплаву ВД17 було отримано розподіл температур в зоні іонізуючого випромінювання на різних глибинах матеріалу. Також були побудовані поля температур для різних щільностей теплового потоку. Отримані температурні поля для деяких теплових потоків показали, що зі збільшенням глибини матеріалу, температура знижується. При цьому значення максимальних температур на поверхні матеріалу вище, ніж необхідно для отримання наноструктур. На нижчих глибинах максимальні температури знижуються до значень, при яких можуть реалізовуватися наноструктури. Однак при цьому не було проведено аналіз впливу енергії кристалізації на енергію іонів необхідну для утворення наноструктур у поверхневих шарах алюмінію. Завдяки цьому можливо більш точніше підібрати технологічні параметри для реалізації наноструктурних та субмікроструктурних

шарів на алюмінієвих сплавах та підвищити їх фізико-механічні характеристики.

Для вирішення цього завдання ми використовуємо модель, що була запропонована у [24, 27]. У цій моделі розглядається вплив енергії іонів на теплопровідність та термоджестність в області дії іонів. Спочатку ми оцінюємо потенційну кількість частинок у наноструктурі. Потім обчислюємо енергію для атомізації зерна з атомів і хімічних сполук. Знаходячи загальну енергію атомізації зерна ( $E_{ac}$ ), ми визначаємо необхідну енергію для його утворення ( $E_c = 1,1E_{ac}$ ). Ця енергія дозволяє визначити всі характеристики в області дії іонів, такі як температура, швидкість зростання температури, температурні напружки, швидкість деформації, розмір зерна, обсяг та глибина наноструктури, а також кількість частинок у наноструктурі.

### 1.1. Теоретична модель та постановка задачі дослідження

Використовуючи вищезазначене, ми отримуємо нові значення розглянутих величин, що дозволить визначити їх вплив на утворення наноструктур.

Після визначення кількості частинок у наноструктурі ми повинні визначити їхню енергію атомізації, враховуючи енергію Кулонівського відштовхування  $E_k$  та енергію іонного зв'язку  $E_{ib}$  за формулою

$$E_c = E_k + E_{ib} = \varepsilon^2 U + (1 - \varepsilon^2)^{\frac{1}{2}} D_0 N = -\frac{\varepsilon^2 k_M e^2 z^2 N}{R_0} \left(1 - \frac{\rho}{R_0}\right) + (1 - \varepsilon^2)^{\frac{1}{2}} D_0 N, \quad (1)$$

де:  $\varepsilon$  – ступінь іонності;  $U$  – енергія взаємодії іонів;  $k$  – електростатична постійна,

$k = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \approx 8,987742438 \cdot 10^9$ ;  $M$  – постійна Маделунга;  $e$  – заряд електрону;

$z$  – заряд іона;  $N$  – кількість частинок;  $R_0$  – коротша міжатомна відстань;  $\rho$  – ступінь відштовхування;  $D_0$  – енергія дисоціації однієї частки речовини.

Ступінь іонності  $\varepsilon$  для речовин АВ визначимо за виразом:

$$\varepsilon = \frac{X_A - X_B}{X_A + X_B}, \quad (2)$$

де:  $X_A, X_B$  – ступінь окислення для елементів А і В за шкалою Полінга.

Постійну Маделунга  $M$  визначимо наступним чином:

$$M = \sum_j^n \frac{z_i z_j}{P_{ij}}; \quad (3)$$

де  $z_i, z_j$  – заряди взаємодіючих іонів.

Енергію електростатичної кулонівської взаємодії визначимо наступним чином:

$$P_{ij} = \frac{e^2 z_i z_j}{R_{ij}}, \quad (4)$$

де,  $R_{ij}$  – відстань між зарядами  $i, j$ , яку можливо виразити як  $R_{ij} = P_{ij} * R_0$ .

Тоді енергію взаємодії  $i$ -го іона з усіма іншими іонами ( $n$ ) представимо у вигляді:

$$U = \frac{1}{2} \left( n \sum_i^n \frac{e^2 z_i z_j}{R_0} * \frac{1}{P_{ij}} + n \sum_j^n \frac{e^2 z_i z_j}{R_0} * \frac{1}{P_{ij}} \right) = \frac{n e^2}{R_0} \sum_j^n \frac{z_i z_j}{P_{ij}}; \quad (5)$$

Використання у (1) множника  $1/2$  обумовлено тим, що використовувати взаємодіючу пару іонів будемо тільки один раз.

Ступінь відштовхування  $\rho$  залежить від величини та характеру деформації

зерен. При збільшенні стиснення кристалу його опір швидко зростає. Іони відштовхуються один від одного, причому чим ближче зближуються іони один до одного, тим більшими стають сили відштовхування. Оскільки відштовхуються електронні оболонки іонів, що проникають одна в одну, то правильний опис цих сил можливий на основі квантової механіки або методу Борна [20], відповідно до формули:

$$\frac{1}{\rho} = \frac{2}{R_0} + \frac{9V}{M\beta}; \quad (6)$$

де  $V$  – об'єм моля кристалу;  $M$  – постійна Маделунга;  $\beta$  – стисливість кристалів.

Існує зв'язок між показниками відштовхування та орбітальними експонентами, які пов'язують атомні орбіталі [20]. Для оксидів та халкогенідів цей зв'язок можна представити у наступному вигляді:

$$\frac{1}{\rho} \approx (1 + \varepsilon)(\xi_m + \xi_x); \quad (7)$$

де  $\xi_m$  та  $\xi_x$  – орбітальні експоненти атомних орбіталей металу (м) та галогену (х).

Оцінку значення орбітальної експоненти можливо отримати за допомогою першого потенціалу іонізації (І), визначеного у рідбергах ( $1Ry = 13,6 \text{ эВ} = 313 \text{ ккал}$ ):

$$\xi = \sqrt{I}; \quad (8)$$

Міжатомну відстань  $R_0$  для речовин А та В визначимо як суму ковалентних радіусів:

$$R_0 = R_k(A) + R_k(B); \quad (9)$$

Енергію дисосипації  $D_0$  експериментально визначено для багатьох речовин, але для запобігання обмежень при оціненні енергій ковалентних зв'язків для  $D_0$  кристалів використаємо загальний постулат Полінга:

$$D_0 = \sum_{i=1}^m \Delta H_{ат}(i); \quad (10)$$

Для перевірки розробленої моделі розглянемо вплив іонів азоту та кисню у плазмовому середовищі на алюмінієвому сплаві ВД17. Теоретичні розрахунки енергії кристалізації, які залежать від енергії іонів та враховують число частинок в кластері, були виконані без урахування енергії кристалізації і наведені у [22]. Далі, на основі вдосконаленої теоретичної моделі, ми порівняємо розмір теоретично розрахованого нанозерна з урахуванням та без урахування енергії кристалізації. Якщо припустити, що енергія кристалізації майже або повністю співпадає з енергією атомізації, то під час розрахунків ми отримаємо енергію атомізації для різних хімічних сполучень при різних зарядових числах, ступенях відштовхування та енергіях дисоціації.

## 2. Результати розрахунків

Використовуючи розраховані значення енергії атомізації і знаючи кількість часток у нанокластері, взяті з [22], ми знаходимо енергію, необхідну для отримання зерна. Для забезпечення більшої ймовірності його утворення ми збільшуємо цю величину на 10% і використовуємо в подальших розрахунках.

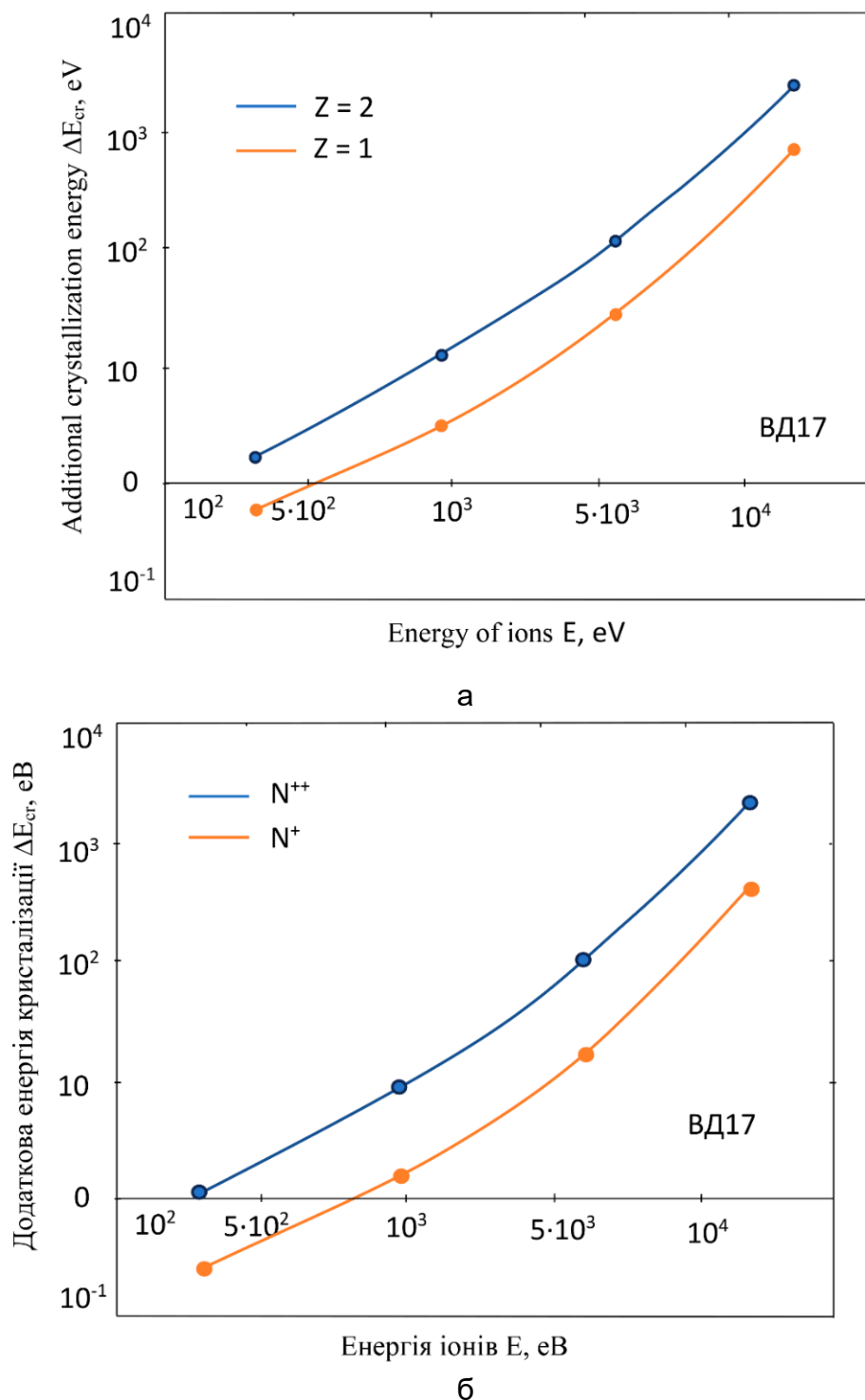
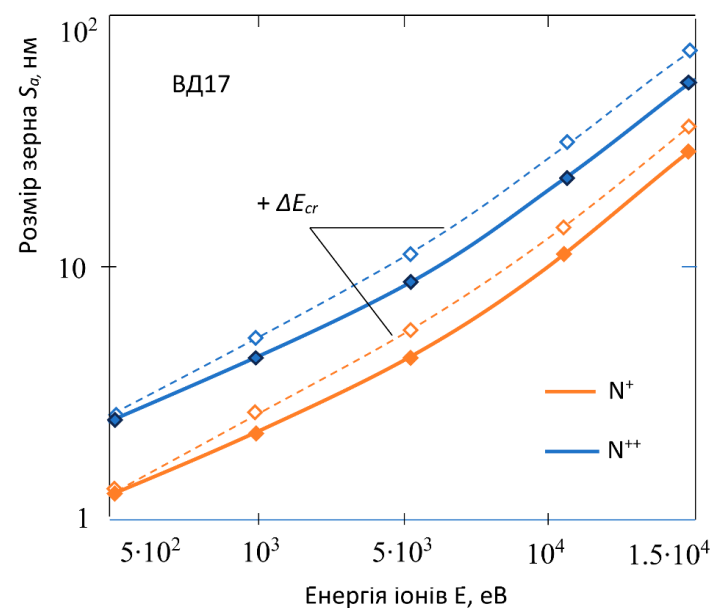
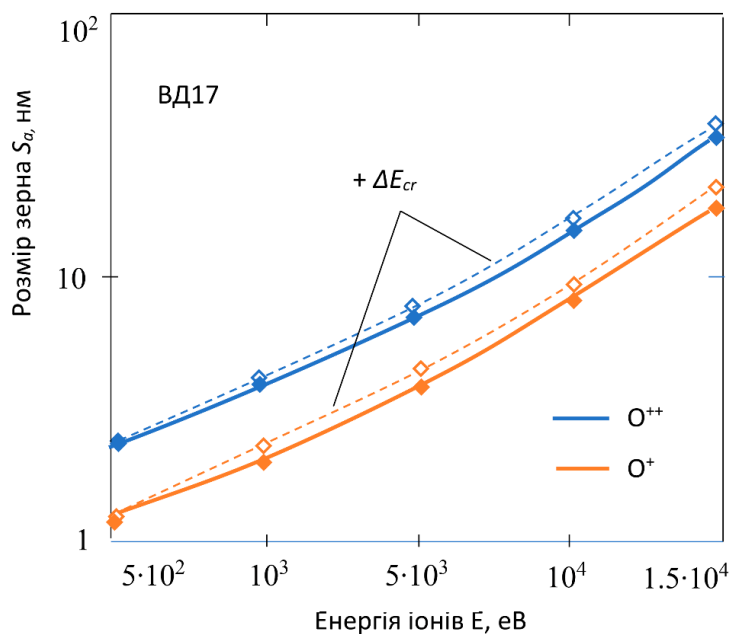


Рис. 1. Залежність додаткової енергії кристалізації від енергії іонів при різних зарядах іона: а) іони азоту, б) іони кисню, при дії на алюмінієвий сплав ВД17.

Результати дослідження залежності енергії кристалізації від енергії іонів діючих на алюмінієвий сплав представлені на рис. 1 для випадку дії іонів азоту (а) і кисню (б).



а



б

Рис. 2. Залежність розміру зерна від енергії іонів а) іони азоту, б) іони кисню з зарядом: 1)  $z = 1$ ; 2)  $z = 2$ ; при їх дії на алюмінієвий сплав ВД17 з урахуванням  $\Delta E_{cr}$  і без урахування  $\Delta E_{cr}$ , що витрачається на кристалізацію.

Можемо спостерігати, що при енергії іонів 300 еВ, енергія кристалізації коливається в межах: (0,1-7) еВ для іонів азоту та (0,25-9) еВ для іонів кисню. При цьому великі значення відповідають іонам з більшим зарядом ( $z = 2$ ). При енергії іонів  $1,5 \cdot 10^4$  еВ, енергія кристалізації становить вже  $(2,7 \cdot 10^3 - 9 \cdot 10^4)$  еВ для іонів азоту та  $(5 \cdot 10^2 - 1,1 \cdot 10^4)$  еВ для іонів кисню, де великі значення відповідають більшим зарядам іонів. Така залежність енергії кристалізації від енергії іонів пов'язана зі зменшенням об'єму нанокластера зі зростанням енергії іонів і, відповідно, енергії кристалізації.

Очевидно, що енергія кристалізації впливатиме на технологічні параметри, необхідні для формування наноструктур. Для цього були розраховані залежності розміру зерна від енергії іонів з урахуванням і без урахування енергії кристалізації, використовуючи модель [22]. Такі залежності представлені на рис. 2.2 для випадку дії іонів азоту та кисню.

Так, при дії іонів азоту з енергією  $3 \cdot 10^2$  еВ, розмір зерна може становити від 1,7 до 6 нм, тоді як при енергії іонів  $1,5 \cdot 10^4$  еВ вони можуть зростати до 15-30 нм. Для іонів кисню з енергією 300 еВ їх розміри знаходяться в межах від 1,5 до 5,5 нм, а при  $1,5 \cdot 10^4$  еВ. розмір зерна збільшується до 10-50 нм.

### Висновки

Проведені теоретичні дослідження показали, що енергії іонів 300 еВ енергією кристалізації до 7 еВ можна знехтувати. Однак, при енергіях іонів до  $1,2 \cdot 10^4$  еВ, енергія кристалізації становить від  $2 \cdot 10^2$  до  $1,1 \cdot 10^3$  еВ. Крім того, розрахунки показали, що заряд іонів суттєво впливає на енергію кристалізації, збільшуючи її для великих зарядів іонів.

Усе це свідчить про те, що важливо враховувати енергію кристалізації лише при енергіях іонів в діапазоні від  $2 \cdot 10^3$  до  $2 \cdot 10^4$  еВ. Урахування цього фактору дозволить уточнити технологічні параметри для іонно-плазмової обробки алюмінію та підвищити ймовірність отримання наноструктур. Це може бути корисно для фахівців, які працюють над створенням пристроїв для отримання наноструктур.

### Список літератури

1. Starke, E. A. Application of modern aluminum alloys to aircraft / E. A. Starke, J. T. Staley // Progress in Aerospace Sciences. – 1996. – № 32, – P. 131-172. [https://doi.org/10.1016/0376-0421\(95\)00004-6](https://doi.org/10.1016/0376-0421(95)00004-6)
2. Stojanovic, B., Application of aluminum and aluminum alloys in engineering. / B. Stojanovic, M. Bukvic, I. Epler // Applied Engineering Letters. – 2018. – № 2 (36) – P. 52-63. DOI: 10.18485/aeletters.2018.3.2.2
3. Miller, W.S. Recent development in aluminium alloys for the automotive industry / W.S Miller, L Zhuang, J Bottema, A.J Wittebrood, P De Smet, A Haszler, A. Vieregge // Materials Science and Engineering. – 2000. – Vol. 280, No. 1. – P. 37–49, ISSN 0921-5093. [https://doi.org/10.1016/S0921-5093\(99\)00653-X](https://doi.org/10.1016/S0921-5093(99)00653-X).
4. Trudonoshyn, O. Use of the ABI technique to measure the mechanical properties of aluminium alloys: Effect of heat-treatment conditions on the mechanical properties of alloys / Trudonoshyn, Oleksandr & Puchnin, Maxim & Prach, Olena // Materiali in tehnologije. – 2016. – № 50, – P. 427-431. DOI: 10.17222/mit.2014.295.
5. Becker, M. Chromate-free chemical conversion coatings for aluminum alloys / Becker, Markus // Corrosion Reviews. – 2019. – № 37, – P. 321–342. <https://doi.org/10.1515/corrrev-2019-0032>
6. Wen, H. Strengthening mechanisms in a high-strength bulk nanostructured Cu–Zn–Al alloy processed via cryomilling and spark plasma sintering / H. Wen, T. D. Topping, D. Isheim, D. N. Seidman, E. J. Lavernia // Acta Materialia. – 2013, № 8 (61). – P. 2769–2782. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2012.09.036>.
7. Tellkamp, V.L. Mechanical behavior and microstructure of a thermally stable bulk nanostructured Al alloy / V.L. Tellkamp, E.J. Lavernia & A. Melmed, // Metal Mater Tran. – 2001. – № 32. – P. 2335–2343 <https://doi.org/10.1007/s11661-001->

0207-6

8. Mehdizade, M. Investigation of anodizing time and pulse voltage modes on the corrosion behavior of nanostructured anodic layer in commercial pure aluminum / Maryam Mehdizade, Mansour Soltanieh, Ali Reza Eivani // *Surface and Coatings Technology*. – 2019. – №. 358, – P. 741–752.

<https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2018.08.046>.

9. Ghalimi, Z. Durability of nanostructured coatings based on PTFE nanoparticles deposited on porous aluminum alloy / Zahira Ghalimi, Masoud Farzaneh // *Applied Surface Scienc.* – 2014. – №. 314, – P. 564-569, ISSN 0169-4332. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2014.05.194>.

10. Kostyuk, G. Prospects for producing nanostructures in the volume of parts under the action of plasma flows / G. Kostyuk, O. Melkozirova, E. Kostyuk, I. Shirokiy // *Різання та інструменти в технологічних системах*. – Х.: НТУ «ХПІ». – 2020. – No. 92. – P. 107-121. <https://doi.org/10.20998/2078-7405.2020.92.12>

11. Baranova, T A, Microarc synthesis of nanostructured radiation-absorbing coatings on aluminum and titanium surface / Baranova, T A, Chubenko, A K, Ryabikov, A E, Mamaev, A I, Mamaeva, V A, Beletskaya, E Yu // *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. – 2017.– №. 286, – P. 1757-8981.

<http://dx.doi.org/10.1088/1757-899X/286/1/012037>

12. Jafari, R., Fabrication of superhydrophobic nanostructured surface on aluminum alloy / R. Jafari, M. Farzaneh // *Appl. Phys.*– 2011.– Vol. 102, P. 195–199. <https://doi.org/10.1007/s00339-010-6131-0>

13. Kostyuk, G. I. Experimental study of the flat details' temperature fields at the laser beam motion and nanostructures formation / G.I. Kostyuk, Yu. V. Shirokiy // *Proceedings of XIII international conference on modern achievements of science and education September 6-13 2018*. – Netanya (Israel), 2018. – P.78-80. [http://www.iftomm.ho.ua/docs/MASE\\_2018.pdf](http://www.iftomm.ho.ua/docs/MASE_2018.pdf)

14. Zhang, C. The microstructure and properties of nanostructured Cr-Al alloying layer fabricated by high-current pulsed electron beam / C. Zhang, P. Lv, H. Xia, Z. Yang, S. Konovalov, X. Chen, Q. Guan // *Vacuum*. – 2019. – Vol. 167. – P. 263-270. <https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2019.06.022>.

15. Barthwal, S. Rapid fabrication of a dual-scale micro-nanostructured superhydrophobic aluminum surface with delayed condensation and ice formation properties [Text] / Barthwal, Sumit, Lim, Si-Hyung // *Soft Matter*, The Royal Society of Chemistry. – 2019. – P. 15-39. <http://dx.doi.org/10.1039/C9SM01256G>

16. Baranova, T. A. Microarc synthesis of nanostructured radiation-absorbing coatings on aluminum and titanium surfaces/ T. A. Baranova, A. K. Chubenko, A. E. Ryabikov, A. I. Mamaev, V. A. Mamaeva, E. Yu. Beletskaya. // *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. – 2017. – Vol. 286. – P. 1757-8981. <http://dx.doi.org/10.1088/1757-899X/286/1/012037>

17. Baranov, V. Study of strength properties of semi-finished products from economically alloyed high-strength aluminum-scandium alloys for application in automobile transport and shipbuilding / V. Baranov, S. Sidelnikov, E. Zenkin, V. Frolov, D. Voroshilov, O. Yakiviyuk, I. Konstantinov, R. Sokolov and I. Belokonova, // *Open Engineering*. – 2018. – № 1(8). – P. 69-76. <https://doi.org/10.1515/eng-2018-0005>

18. Wahid, M.A. Aluminum alloys in marine construction: characteristics, application, and problems from a fabrication viewpoint [Text] / M. A. Wahid, A. N. Siddiquee & Z. A. Khan, // *Mar Syst Ocean Technol.* – 2020. – №.15. – P. 70-80. <https://doi.org/10.1007/s40868-019-00069-w>.



19. Fahim, J. Cavitation erosion behavior of super-hydrophobic coatings on Al5083 marine aluminum alloy / J. Fahim, S.M.M. Hadavi, H. Ghayour, S. A. Hassanzadeh Tabrizi // *Wear.* – 2019. – №. 424. – P. 122-132. <https://doi.org/10.1016/j.wear.2019.02.017>.
20. Baranov, O. Plasma under control: Advanced solutions and perspectives for plasma flux management in material treatment and nanosynthesis / O. Baranov, K. Bazaka, H. Kersten, M. Keidar, U. Cvelbar, S. Xu, I. Levchenko // *Applied Physics Reviews.* – 2017. – Vol. 4, No. 4. – P. 041302-1-041302-33. <https://doi.org/10.1063/1.5007869>
21. Shyrokyi, Y. Investigation of the Influence of Crystallization Energy on the Size of Nanostructures During Copper Ion-Plasma Treatment. / Y. Shyrokyi, G. Kostyuk // *Integrated Computer Technologies in Mechanical Engineering - 2021. ICTM 2021. Lecture Notes in Networks and Systems.* – 2021. – № 367. P. 502-512. [https://doi.org/10.1007/978-3-030-94259-5\\_6](https://doi.org/10.1007/978-3-030-94259-5_6)
22. Kostyk, K. Ensuring the High Strength Characteristics of the Surface Layers of Steel Products / K. Kostyk, V. Kostyk, O. Akimov, K. Kamchatna-Stepanova, Y. Shyrokyi // *Advanced Manufacturing Processes III. InterPartner 2021. Lecture Notes in Mechanical Engineering.* Springer, Cham. – 2022.– № 9. – P. 292-301. [https://doi.org/10.1007/978-3-030-91327-4\\_29](https://doi.org/10.1007/978-3-030-91327-4_29)
23. Bruera, F.A. Evaluation of the influence of synthesis conditions on the morphology of nanostructured anodic aluminum oxide coatings on Al 1050 [Text] / F.A. Bruera, G.R. Kramer, M.L. Vera, A.E. Ares // *Surfaces and Interfaces.* – 2020. – Vol 18. – P100448. <https://doi.org/10.1016/j.surfin.2020.100448>.
24. Гусев, А. И. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии / А. И. Гусев./ – М.: Физматлит, 2005. – 416 с
25. Popov, V. Design of New Nanocoatings Based on Hard Alloy / V. Popov, G. Kostyuk, O. Tymofeyev, K. Kostyk, O. Naboka, // In: et al. *Advances in Design, Simulation and Manufacturing III. DSMIE 2020. Lecture Notes in Mechanical Engineering..* – 2020. – P. 522-531. [https://doi.org/10.1007/978-3-030-50794-7\\_51](https://doi.org/10.1007/978-3-030-50794-7_51)
26. Kostyuk, G. Determination of Technological Parameters for Obtaining Nanostructures under Pulse Laser Radiation on Steel of Drone Engine Parts, [Text]/ G. Kostyuk, M. Nechyporuk and K. Kostyk, // 2019 10th International Conference on Dependable Systems, Services and Technologies (DESSERT). – 2019. – P. 208-212. doi: 10.1109/DESSERT.2019.8770053.
27. Широкий, Ю. В. Моделювання умов отримання наноструктур в алюмінієвих сплавах при дії іонізуючого випромінювання / Ю. В. Широкий, Ю. О. Сисоєв, Т. В. Постельник // *Авіаційно-космічна техніка та технологія: сб. науч. тр. Нац. аерокосм. ун-та им. Н. Е. Жуковского «ХАИ».* – 2022, – №. 2. – С. 55-63 <https://doi.org/10.32620/aktt.2022.2.07>

## References

1. Starke, E. A., Staley, J. T. Application of modern aluminum alloys to aircraft *Progress in Aerospace Sciences*, 1996, vol. 32, no. 2-3, pp. 131-172.
2. Stojanovic, B., Bukvic, M., Epler, I. Application of aluminum and aluminum alloys in engineering *B Applied Engineering Letter*, 2018, vol. 36, no. 2. pp. 52-63.
3. Miller, W. S., Zhuang, L., Bottema, J., Wittebrood, A.J., P. De Smet, Haszler, A., Vieregge, A. Recent development in aluminium alloys for the automotive industry *Materials Science and Engineering*, 2000, vol. 280, no. 1, pp. 37-49,

4. Trudonoshyn, O., Puchnin, M., Prach, O. Use of the ABI technique to measure the mechanical properties of aluminium alloys: Effect of heat-treatment conditions on the mechanical properties of alloys. *Materiali in tehnologije*, 2016, vol. 50, pp. 427–431
5. Becker, M. Chromate-free chemical conversion coatings for aluminum alloys. *Corrosion Reviews*, 2019, vol. 37, no. 4, pp. 321–342.
6. Wen, H., Topping, T. D., Isheim, D., Seidman, D. N., Lavernia, E. J. Strengthening mechanisms in a high-strength bulk nanostructured Cu–Zn–Al alloy processed via cryomilling and spark plasma sintering. *Acta Materialia*, 2013, vol. 61, no 8. pp. 2769–2782.
7. Tellkamp, V. L., Lavernia, E. J., Melmed, A., Mechanical behavior and microstructure of a thermally stable bulk nanostructured Al alloy. *Metall Mater Tran*, 2001, no 32, pp. 2335–2343.
8. Mehdizade, M., Soltanieh, M., Eivani, A. R., Investigation of anodizing time and pulse voltage modes on the corrosion behavior of nanostructured anodic layer in commercial pure aluminum. *Surface and Coatings Technology*, 2019, vol. 358, pp. 741–752.
9. Zahira Ghalimi, Masoud Farzaneh Durability of nanostructured coatings based on PTFE nanoparticles deposited on porous aluminum alloy. *Applied Surface Scienc*, 2014, vol. 314, pp. 564–569. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2014.05.194>.
10. Kostyuk, G., Melkozirova, O., Kostyuk, E., Shirokiy, I. Prospects for producing nanostructures in the volume of parts under the action of plasma flows *Rizannya ta instrumenti v tekhnologichnih sistemah*. H.: NTU «HPI», 2020, no. 92, pp. 107–121.
11. Baranova, T. A., Chubenko, A. K., Ryabikov, A. E., Mamaev, A. I., Mamaeva, V. A., Beletskaya, E. Yu. Microarc synthesis of nanostructured radiation-absorbing coatings on aluminum and titanium surface *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 2017, vol. 286, pp. 1757–8981.
12. Jafari, R., Farzaneh, M. Fabrication of superhydrophobic nanostructured surface on aluminum alloy. *Appl. Phys.*, 2011, vol. 102, pp. 195–199.
13. Kostyuk, G. I., Shirokiy, Yu. V. Experimental study of the flat details temperature fields at the laser beam motion and nanostructures formation. *Proceedings of XIII international conference on modern achievements of science and education 2018. September 6–13 Netanya (Israel)*, 2018. pp.78–80.
14. Zhang, P. Lv, Xia, H. Yang, Z., Konovalov, S., Chen, X., Guan, Q. C. The microstructure and properties of nanostructured Cr–Al alloying layer fabricated by high-current pulsed electron beam, *Vacuum*, 2019, vol. 167. pp. 263–270.
15. Barthwal, S., Lim, S. Rapid fabrication of a dual-scale micro-nanostructured superhydrophobic aluminum surface with delayed condensation and ice formation properties. *Soft Matter*, The Royal Society of Chemistry. 2019. pp. 15–39.
16. Baranova, T. A., Chubenko, A. K., Ryabikov, A. E., Mamaev, A. I., Mamaeva, V. A., Beletskaya, E. Yu. Microarc synthesis of nanostructured radiation-absorbing coatings on aluminum and titanium surfaces. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 2017, vol. 286, pp. 1757–8981.
17. Baranov, S., Sidelnikov, E., Zenkin, V., Frolov, D., Voroshilov, O., Yakivuk, I., Konstantinov, R., Sokolov and Belokonova, I. V. Study of strength properties of semi-finished products from economically alloyed high-strength aluminium-scandium alloys for application in automobile transport and hipbuilding. *Open Engineering*, 2018, vol. 8, no 1, pp. 69–76.

18. Wahid, M. A., Siddiquee, A. N., Khan, Z. A. Aluminum alloys in marine construction: characteristics, application, and problems from a fabrication viewpoint. *Mar Syst Ocean Technol*, 2020, vol.15, pp. 70–80.
19. Fahim, J., Hadavi, S. M. M., Ghayour, H., Hassanzadeh S. A. Tabrizi Cavitation erosion behavior of super-hydrophobic coatings on Al5083 marine aluminum alloy. *Wear*, 2019, vol. 424–425, pp. 122-132.
20. Baranov, O., Bazaka, K., Kersten, H., Keidar, M., Cvelbar, U., Xu, S., Levchenko, I. Plasma under control: Advanced solutions and perspectives for plasma flux management in material treatment and nanosynthesis *Applied Physics Reviews*, 2017, vol. 4, no. 4, pp. 041302-1-041302-33.
21. Shyrokyi, Y., Kostyuk, G. Investigation of the Influence of Crystallization Energy on the Size of Nanostructures During Copper Ion-Plasma Treatment. In eds. *Integrated Computer Technologies in Mechanical Engineering - 2021. ICTM 2021. Lecture Notes in Networks and Systems*, 2021, vol 367. Springer, Cham.
22. Kostyk, K., Kostyk, V., Akimov, O., Kamchatna-Stepanova, K., Shyrokyi, Y. Ensuring the High Strength Characteristics of the Surface Layers of Steel Products. *Advanced Manufacturing Processes III. InterPartner 2021. Lecture Notes in Mechanical Engineering*. Springer, Cham, 2022, vol. 9, pp. 292–301.
23. Bruera, F. A., Kramer, G. R., Vera, M. L., Ares, A. E. Evaluation of the influence of synthesis conditions on the morphology of nanostructured anodic aluminum oxide coatings on Al 1050. *Surfaces and Interfaces*, 2020, vol 18, pp. 100448. <https://doi.org/10.1016/j.surfin.2020.100448>.
24. Popov, V., Kostyuk, G., Nechyporuk, M., Kostyk K. Study of Ions Energy, Their Varieties and Charge on Temperature, Rate of Temperature Rise, Thermal Stresses for Nanostructures on Construction Materials. In: et al. *Advanced Manufacturing Processes. InterPartner 2019. Lecture Notes in Mechanical Engineering*. Springer, Cham, 2020, pp. 470–477.
25. Gusev, A. I. *Nanomaterialy, nanostruktury, nanotekhnologii*. M.: Fizmatlit, 2005, pp. 416.
26. Popov, V., Kostyuk, G., Tymofyeyev, O., Kostyk, K., Naboka, O. Design of New Nanocoatings Based on Hard Alloy. In: et al. *Advances in Design, Simulation and Manufacturing III. DSMIE 2020. Lecture Notes in Mechanical Engineering*. Springer, Cham, 2020, pp. 522–531
27. Shyrokyi, Yu.V., Sysoyev, Yu.O., Postel'nyk, T.V., *Modelyuvannya umov otrymannya nanostruktur v alyuminiyevykh splavakh pry diyi ionizuyuchoho vyprominyuvannya, Aviatsiyno-kosmichno tekhnika ta tekhnolohiya: sb. nauch. tr. Nats. aerokosm. un-ta ym. N.E. Zhukovskoho «KhAY»*, 2022, no 2, pp. 55-63

Надійшла в редакцію 20.12.2023, розглянута на редколегії 20.12.2023

### **Determining the influence of internal energies of the crystal lattice on the formation of nanostructures in the surface layers of aluminum alloys**

The paper presents the results of calculating the crystallization energy and examines its influence on the size of the nanostructured grain during ion-plasma treatment of aluminum (VD17) with oxygen and nitrogen ions. To address this task, we employ a previously proposed model, which considers the impact of individual ions on

thermal conductivity and thermoelasticity in the affected area, taking into account their energy, charge, and type. Initially, we estimate the potential number of particles in the nanostructure. Then, we compute the energy required for atomizing the grain from atoms and chemical compounds. By determining the total atomization energy of the grain ( $E_{as}$ ), we establish the necessary energy for its formation ( $E_s = 1.1E_{as}$ ). This energy enables the determination of all characteristics in the ion's action area, such as temperature, temperature rise rate, thermal stresses, strain rate, grain size, volume, and depth of the nanostructure, as well as the actual number of particles in the nanostructure. The calculations demonstrate that the crystallization energy increases the ion energy required to obtain nanostructures. At energies close to  $3 \cdot 10^2$  eV, it ranges from 0.1 to 7 eV, which can be disregarded, while at energies close to  $1.6 \cdot 10^4$  eV, crystallization energy ranges from  $2.1 \cdot 10^2$  to  $1.2 \cdot 10^4$  eV, with higher values for oxygen ions. Additionally, the calculations show that ion charge significantly affects crystallization energy; for large ion charges, it increases. All of this underscores the necessity of considering crystallization energy only at energies of  $2 \cdot 10^3$  –  $2 \cdot 10^4$  eV, allowing refinement of the technological parameters of ion-plasma treatment of aluminum alloys to increase the likelihood of obtaining nanostructures. Furthermore, the ability to determine the sizes of nanostructures allows predicting the physical and mechanical characteristics of surface layers of processed materials. These studies may be of interest to specialists involved in surface strengthening of aluminum alloy surfaces and further research into nanostructures

**Keywords:** Nanostructures, ion-plasma treatment, temperature, ion energy, heat flux, aluminum alloy, technological parameters.

#### **Відомості про авторів:**

**Широкий Юрій Вячеславович** – кандидат технічних наук, доцент, кафедри теоретичної механіки, машинознавства та роботомеханічних систем, Національний аерокосмічний університет ім. М. Є. Жуковського «Харківський авіаційний інститут» м. Харків, Україна; i.shyrokyi@khai.edu; ORCID: 0000-0002-4713-0334

#### **About the Authors:**

**Shyrokyi Yurii Vyacheslavovich** – Doctor of Philosophy, Assistant-Professor, Head of Department of Theoretical Mechanics, Engineering and Robomechanical Systems, National Aerospace University “Kharkiv Aviation Institute”, Kharkiv, Ukraine; i.shyrokyi@khai.edu; ORCID: 0000-0002-4713-0334