УФИМСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

приоритет2030
лидерами становятся

ФИЗИКА И ТЕХНОЛОГИЯ ПЕРСПЕКТИВНЫХ МАТЕРИАЛОВ – 2026 (PHYSICS AND TECHNOLOGY OF ADVANCED MATERIALS – 2026)

Сборник трудов Международной конференции (г. Уфа, 4–9 октября 2026 г.)



Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Российская Академия Наук
Институт проблем сверхпластичности металлов РАН
Уфимский университет науки и технологий
Уфимский государственный нефтяной технический университет

ФИЗИКА И ТЕХНОЛОГИЯ ПЕРСПЕКТИВНЫХ МАТЕРИАЛОВ – 2026
(PHYSICS AND TECHNOLOGY OF ADVANCED MATERIALS – 2026)

Сборник трудов
Международной конференции
(г. Уфа, 4–9 октября 2026 г.)

Научное электронное издание сетевого доступа

Уфа
Уфимский университет
2026

УДК 620.1/.2+539.3/.5+621.7
ББК 30.3+30.121+30.68
Ф50

Публикуется по решению кафедры теоретической физики ФТИ УУНиТ.
Протокол № 6 от 26.08.2026 г.

Редакционная коллегия:
д-р физ.-мат. наук, академик РАН, профессор,
научный руководитель ИПСМ РАН **Р. Р. Мулюков** *(отв. редактор)*;
д-р физ.-мат. наук, зам. директора по научной работе ИПСМ РАН
А. А. Назаров;
д-р физ.-мат. наук, профессор РАН, зав. лабораторией ИПСМ РАН
Ю. А. Баимова;
д-р физ.-мат. наук, профессор, профессор кафедры ФТН УУНиТ
Ю. М. Юмагузин;
канд. физ.-мат. наук, научный сотрудник ИПСМ РАН **Л. Х. Галиахметова**

Физика и технология перспективных материалов – 2026: сборник трудов
Ф50 Международной конференции (г. Уфа, 4–9 октября 2026 г.) / отв. ред. Р. Р. Мулюков [Электронный ресурс] / Уфимск. ун-т науки и технологий. – Уфа: Уфимский университет, 2026. – 394 с. – URL: https://uust.ru/media/documents/digital-publications/2026/282.pdf – Загл. с титула экрана.
ISBN 978-5-7477-6515-3

В сборнике представлены последние достижения в области физики и технологии обработки перспективных материалов. Представленные доклады посвящены широкому кругу проблем современного материаловедения: получение новых материалов различной природы и различного назначения, изучение электронной, атомной структуры, микроструктуры, физических, физико-химических и механических свойств материалов, исследование структурных, фазовых превращений в материалах в процессах обработки, а также их применение, повышение ресурса деталей и конструкций, используемых в промышленности и т. д.

Сборник предназначен для интересующихся проблемами современного материаловедения.

The book presents the latest achievements in the field of physics and technology of processing of advanced materials. The presented reports are devoted to a wide range of problems of the modern materials science, such as development of new materials of various origins and for various purposes, research on the electronic, atomic structure, microstructure, physical, physicochemical and mechanical properties of materials, study of structural, phase transformations in materials in treatment processes, as well as their application, increase of the resource of parts and structures used in industry, etc.

The collection can be of interest for everyone interested in the problems of modern materials science.

УДК 620.1/.2+539.3/.5+621.7
ББК 30.3+30.121+30.68

ISBN 978-5-7477-6515-3

© Уфимский университет, 2026

SECONDARY STRUCTURE OF BETA-AMYLOID (25–35) DETERMINED BY DIFFERENT SPECTROSCOPIC METHODS

G.Z. Najafova[1], G.A. Agaeva[2]

[1]*French-Azerbaijani University – (UFAZ) under Azerbaijan State Oil and Industry University, Baku*
[2]*Institute for Physical Problems, Baku State University, Baku*
e-mail: gulyaz.najafova@ufaz.az

It is well known that in Alzheimer's disease, beta-amyloid peptide (1-40/42) (Aβ) accumulates within neurotic plaques, and its aggregation in the brain represents a central pathological hallmark. The fragment GSNKGAIIGLM, corresponding to Aβ (25–35), is the shortest sequence that retains the toxicity and aggregation properties of the full-length Aβ (1–40/42) peptide [1]. Owing to these characteristics, investigation of the conformational behavior of Aβ (25–35), particularly in its soluble monomeric form and under membrane-mimicking conditions, is essential for understanding structural factors governing oligomerization and aggregation.

In the present work, we integrate and discuss our previously reported spectroscopic investigations of beta-amyloid peptide (25–35). In our earlier circular dichroism (CD) study performed in dipalmitoylphosphatidylcholine (DPPC) systems with and without cholesterol, we demonstrated that the relative proportions of secondary structural elements adopted by the peptide depend strongly on the presence of cholesterol. In particular, liposomes lacking cholesterol promoted formation of a higher fraction of α-helical structure, whereas cholesterol-containing systems promoted increased β-structure and disordered contributions [2]. These findings indicate that membrane-like lipid environments significantly modulate the conformational equilibrium of beta-amyloid peptide (25–35).

In our FTIR spectroscopy investigation of the peptide in aqueous solution at physiological pH (7.4), transmission spectra in the amide I region revealed a dominant band at 1658 cm^{-1} at both 200 μM and 1 mM concentrations [3]. Quantitative analysis showed that the peptide predominantly adopts an α-helical conformation (48%) in water, with approximately 12% disordered structure and 12–15% β-sheet and 13–14% β-turn contributions. After 12 h incubation at 100 μM, the FTIR data demonstrated that the peptide conformation is highly sensitive to environmental conditions. The native folded structure of peptide observed in aqueous medium may represent a relevant intermediate within the aggregation cascade.

Furthermore, our NMR structural study of Aβ peptide (25–35) in a water/HFIP system (80:20 D2O/H2O, 25°C) enabled characterization of the three-dimensional conformational behavior of the molecule [4]. Complete H, C, and N signals were assigned using a combination of TOCSY, NOESY, and HSQC NMR experiments. The spin systems of the significant amino acid residues and their respective ^{1}H and ^{13}C chemical shifts were identified by analyzing intra-residual correlations in the TOCSY spectrum and the ^{1}H–^{13}C HSQC spectrum. The number of inter-residual cross-peaks detected in the NOESY contour map helped resolve all ambiguities. The NMR data suggest the absence of stable secondary structures, as no medium-range dαN (i, i+n) contacts (with n = 2, 3, or 4) were detected in the NOESY spectra. These chemical shifts were then used for secondary structure and dihedral angle prediction using TALOS+, in which the chemical shift dispersion of alpha and amide protons indicates an unfolded peptide conformation (Table.1). Structures calculated using XPLOR-NIH and refined through simulated annealing revealed that conformational organization is mainly localized within the C-terminal segment, whereas the N-terminal region remains predominantly disordered.

To summarize our obtained spectroscopic results, we showed that Aβ-amyloid peptide (25–35) adopts different secondary structure elements with their relative proportions strongly dependent on environmental factors including lipid composition, cholesterol content, solvent system, peptide concentration, and incubation time. Membrane-mimicking systems promote structural ordering

modulated by cholesterol, whereas aqueous conditions favor predominant α-helical organization with additional β-structure and disordered elements. NMR data further highlight preferential structural stabilization within the C-terminal region. Understanding these conformational features may contribute to the identification of molecules capable of interacting with amyloid peptides and inhibiting fibril formation.

Table 1. The dihedral angles of the beta-amyloid peptide (25–35) highlighted in red are shown. The data were obtained using the JRAMA+ viewer and the file "abpeptide.txt". Adapted from [4].

VARS	RESID	RESNAME	PHI	PSI	DPHI	DPSI	DIST	S2	COUNT	CS_COUNT	CLASS
FORMAT	%4d	%s	%8.3f	%8.3f	%8.3f	%8.3f	%8.3f	%5.3f	%2d	%2d	%s
2	S	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0	9	None	
3	N	-68.092	-40.687	13.545	16.455	48.768	0.699	10	13	Good	
4	K	-62.940	-32.888	5.122	12.208	46.505	0.707	10	12	Good	
5	G	-65.520	-38.722	10.005	14.563	47.039	0.732	10	12	Good	
6	A	-63.676	-41.176	5.685	6.146	46.265	0.752	10	13	Good	
7	I	-63.029	-43.836	9.191	4.562	35.617	0.794	10	14	Good	
8	I	-62.727	-43.605	8.705	4.120	40.315	0.807	10	14	Good	
9	G	-61.344	-37.580	7.294	24.158	44.763	0.791	10	14	Good	
10	L	-71.214	-35.302	11.589	13.207	78.754	0.728	10	13	Good	
11	M	9999.00	9999.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0	9	None	

References

1. Kozina, G. Herbert-Alonso, A. Díaz, et al. Effect of the aggregation state of amyloid-beta (25-35) on the brain oxidative stress in vivo. PLOS One, 2024, 19(10), e0310258.
2. G.A. Agaeva, G.Z. Najafova, A.Dj. Mammadova. Circular dichroism spectroscopy study of the spatial structure of β-amyloid peptide (25-35) in a medium with conditions similar to the membrane environment. Journal of Applied Spectroscopy, 2025, 92(2), 293–297.
3. G.Z. Najafova, G.A. Agaeva, Z. Boubegtiten-Fezoua, et al. Conformational particularities of Aβ (25-35) peptide determined by infrared spectroscopy. Advanced Physical Research, 2024, 6(2), 73–82.
4. G.Z. Najafova, G.A. Agaeva, K.S. Rodrigues, et al. Conformational Analysis of Aβ-(25–35) Peptide by NMR: Insights into Secondary Structure and Aggregation Propensity. Mediterranean Journal of Chemistry, 2025, 15(2), 233–240.

DSC INVESTIGATION OF THERMAL BEHAVIOR OF AACVD-SYNTHESIZED MWCNT/EPOXY NANOCOMPOSITES

T.I. Orujova[1, 2], G.K. Gahramanova[1], R.B. Jabbarov[2]

[1]*French-Azerbaijani University (UFAZ), Azerbaijan State Oil and Industry University, Baku*
[2]*Institute of Physics, Ministry of Science and Education of the Republic of Azerbaijan, Baku*
taranaoruc@gmail.com

The rapid development of modern electronics, aerospace technologies, and energy systems has significantly increased the demand for polymer nanocomposites with enhanced thermal performance. Epoxy resin is widely used in electronic and structural applications owing to its excellent mechanical strength, chemical resistance, and outstanding dielectric properties. However, improving its thermal behavior is essential for applications operating under elevated temperatures. Multi-walled carbon nanotubes (MWCNTs), characterized by their exceptionally high theoretical thermal and electrical conductivity as well as high aspect ratio, have emerged as promising nanofillers for enhancing the thermal properties of epoxy-based composites [1,2]. Consequently, the fabrication and thermal characterization of MWCNT/epoxy nanocomposites have become an important research topic in materials science.

In the present study, MWCNTs were synthesized by the aerosol-assisted chemical vapor deposition (AACVD) method. *n*-Heptane was used as the carbon source, while ferrocene dissolved at a concentration of 20 mg/mL served as the catalyst precursor. The synthesis was carried out at **950°C** under an **Ar/H_2** carrier gas atmosphere. An aerosol generated from the precursor solution using an ultrasonic atomizer operating at **800 kHz** was introduced into a quartz reactor, where MWCNTs were deposited on the inner wall of the quartz tube by moving the furnace at a speed of **20 mm min^{-1}.** After the synthesis, the samples were thermally purified in an argon atmosphere at the same temperature with a furnace speed of **2 mm min^{-1},** followed by cooling to room temperature under argon. Detailed information regarding the synthesis procedure and structural characterization of the MWCNTs has been reported in our previous work [3]. Epoxy/MWCNT nanocomposites were fabricated by dispersing the synthesized MWCNTs into a commercial epoxy resin using mechanical stirring followed by ultrasonic dispersion at **45°C** for **4 h** to achieve homogeneous distribution within the polymer matrix. Subsequently, the curing agent was added, and neat epoxy and epoxy nanocomposites containing 1, 2, 3, and 4 wt.% MWCNTs were prepared. The thermal behavior of the prepared samples was investigated using a **NETZSCH DSC 204 F1 Phoenix** differential scanning calorimeter under an argon atmosphere in the temperature range of **20–300°C** at a heating rate of **10°C min^{-1}**. The argon flow rate was maintained at **20 mL min^{-1}** throughout the measurements. Representative DSC thermograms of neat epoxy and epoxy/MWCNT nanocomposites are presented in Fig. 1. Comparative analysis of the DSC thermograms revealed that the incorporation of MWCNTs significantly influenced the thermal characteristics of the epoxy matrix (Fig. 1). Compared with neat epoxy, all nanocomposite samples exhibited noticeable changes in heat-flow characteristics and the intensity of thermal events. A distinct modification of the DSC curve was already observed for the **1 wt.%** MWCNT nanocomposite, while more pronounced thermal effects appeared in the **2 wt.%** sample. At higher MWCNT loadings (**3 wt.%** and **4 wt.%**), additional thermal events were detected in the high-temperature region of the DSC curves. These changes can be attributed to the interaction between MWCNTs and the epoxy matrix, together with microstructural modifications within the composite. The formation of interfacial regions and the increased nanotube concentration are also expected to contribute to the observed thermal response. Furthermore, the dispersion state of MWCNTs within the epoxy matrix at higher filler contents is also expected to contribute to the observed thermal response. The incorporation of carbon nanotubes restricts the mobility of polymer chains and promotes the formation of interfacial regions between the nanotubes and the epoxy matrix, resulting in changes in heat-flow characteristics. Therefore, the differences observed in the DSC

thermograms can be associated with these interfacial interactions and structural modifications induced by the incorporation of MWCNTs.

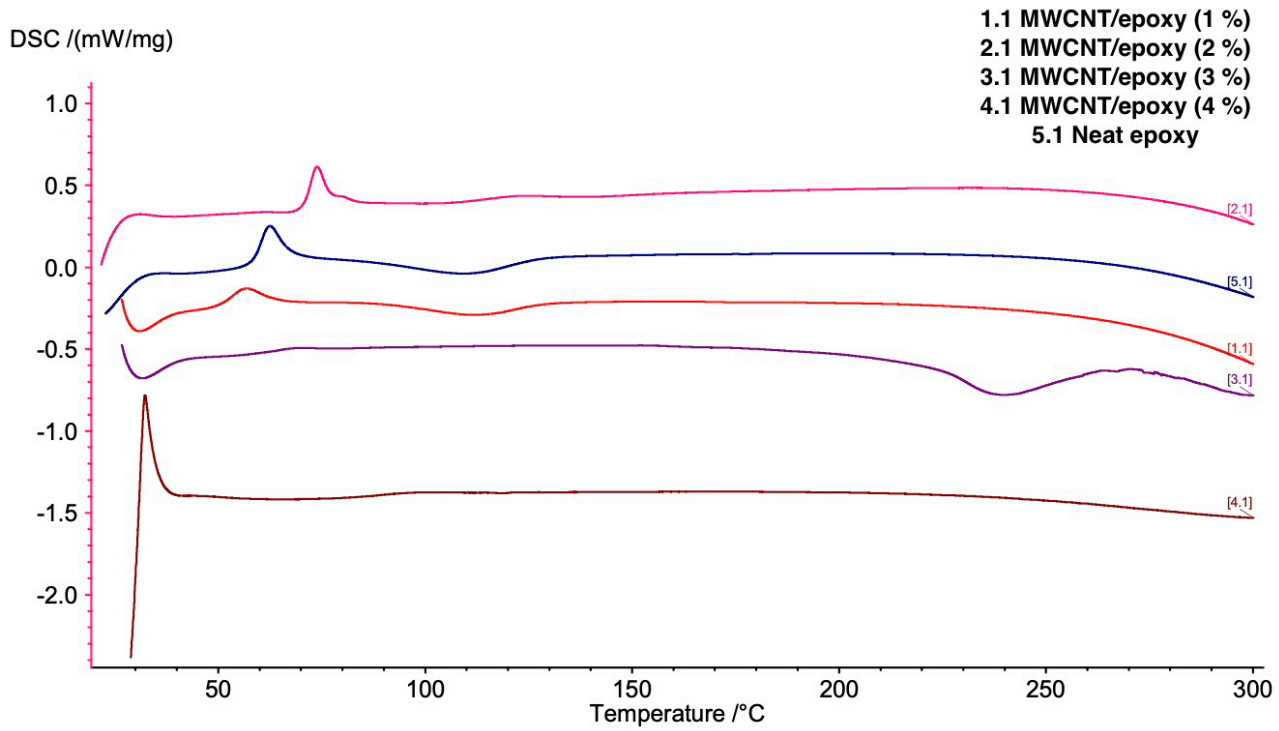


Figure 1. *Comparison of the DSC thermograms of neat epoxy and epoxy nanocomposites containing different MWCNT concentrations.*

The DSC analysis demonstrated that the incorporation of AACVD-synthesized multi-walled carbon nanotubes significantly modifies the thermal behavior of epoxy-based nanocomposites. The observed thermal responses at different MWCNT loadings provide valuable insight into the influence of nanotube concentration on the thermal performance of the composites. Future correlation of DSC results with thermal conductivity measurements will provide deeper insight into heat transport mechanisms and the structure–property relationships governing MWCNT/epoxy nanocomposites.

References

1. K. Yang, M. Gu, Y. Jin, G. Mu, X. Pan. Influence of surface treated multi-walled carbon nanotubes on cure behavior of epoxy nanocomposites. Compos. Part A: Appl. Sci. Manuf., 2008, 39, 1680-1688.
2. A. Forcellese, M. Simoncini, A. Vita, A. Giovannelli, L. Leonardi. Performance analysis of MWCNT/epoxy composites produced by CRTM. J. Mater. Process. Technol., 2020, 286, 116839.
3. T. Orujova, G. Gahramanova, R. Hasanov, R. Jabbarov. Synthesis of multi-walled carbon nanotubes using various carbon sources via chemical vapor deposition – characterization of MWCNT-epoxy nanocomposites. J. Mater. Sci.: Mater. Electron., 2025, 36, 1963.

MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF NICKEL EXOATOM MIGRATION ON THE C_{20} FULLERENE SURFACE

Kh.I. Jabborov

Tashkent State Technical University named after I.A.Karimov
xayitmurodjon@mail.ru

The interaction of transition metal atoms with fullerene molecules has attracted considerable attention due to potential applications in catalysis, molecular electronics, and nanomaterial development [1]. Nickel-functionalized fullerenes are of particular interest, as the presence of the nickel exoatom can alter the electronic and magnetic properties of the carbon framework, affecting its chemical activity and stability [2].

The model system consists of a C_{20} fullerene with a cage structure and a single nickel atom adsorbed on its outer surface. C_{20} is the smallest fullerene capable of forming a closed carbon cage. Its dodecahedral framework contains twenty carbon atoms and twelve pentagonal rings, resulting in pronounced surface curvature and significant structural strain. These features distinguish C_{20} from larger fullerenes and make it a useful model for studying adsorption and atomic transport on highly curved carbon surfaces. The existence of the C_{20} cage structure was experimentally demonstrated by Prinzbach et al. and subsequently confirmed by theoretical analysis of its electronic and structural properties [3]. A single Ni atom was considered as an exohedral adsorbate on the outer surface of C_{20}. Nickel was chosen because its partially filled 3d states provide significant interactions with carbon atoms and the formation of stable metal-carbon coordination. Previous calculations for nickel-decorated fullerenes have shown that isolated nickel atoms can remain bound to bent carbon cages and significantly alter their adsorption properties [4]. In this model, the Ni@C_{20} complex was used to study thermal stability, surface migration, and the movement of a metal atom from one site to another on a nanoscale carbon cage. The first part is designed to describe the interaction in the C_{20} fullerene plane. For the C–C interaction, known potentials can be used, such as the adapted empirical AIREBO intermolecular interaction potential [5]. It has been well tested and is actively used to study carbon structures [6]. The potential consists of three parts:

$$E = \frac{1}{2}\sum_i \sum_{j\neq i} E_{ij}^{REBO} + E_{ij}^{LJ} + \sum_{k\neq i,j} \sum_{l\neq i,j,k} E_{kijl}^{TORSION},$$

where E_{ij}^{REBO} is the energy of covalent interaction, , E_{ij}^{LJ} is the van der Waals energy, $E_{kijl}^{TORSION}$ is the energy of plane rotation.

This potential provides a reliable description of the structural stability and vibrational properties of sp2-carbon systems over a wide temperature range. During the simulations, the structural integrity of the C_{60} cage was maintained over the entire temperature range considered (up to 1700 K), indicating that the potential was used within its applicability.

The Morse potential is used to model both Ni–Ni interactions [7] and Ni–C bonds. The parameters were calibrated against available experimental measurements and ab initio calculations for nickel systems described in previous studies. The parameters adopted in this study are listed in Table 1.

Table 1. Morse potential parameters

Parameters	D_e, [eV]	R_e, Å	α,1/ Å	Ref
Ni-Ni	0.4205	2.78	1.4199	[4]
C-Ni	0.433	2.316	3.244	[5,6]

The results showed that, within the applied interatomic potential, the nickel atom prefers to adsorb predominantly at positions at the edges of the C–C bond or between neighboring carbon atoms, forming stable positions partially offset from the centers of the five-membered rings. The probability of Ni localization strictly at the center of the carbon faces was low, which is consistent with the fact that such positions have shallower local energy minima. The most stable

configurations correspond to the positions of Ni atoms in the spaces between the edges or near the C–C bonds, as shown in Fig. 1.

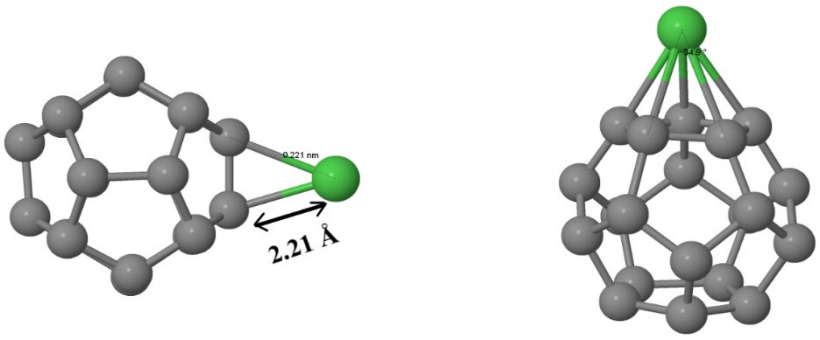


Figure 1. Possible stable positions of the Ni atom on the surface of the C_{20} fullerene after energy minimization. The configurations shown characterize the localization of nickel in different regions of the carbon cage. The C–Ni distance is approximately 2.21 Å.

After equilibration in the NVT ensemble, the Ni@C_{20} system was simulated at temperatures from 1200 to 2000 K with a 100 K interval. Each simulation lasted 1000 ps with a time step of 0.001 ps. The Ni–C_{20} interaction energy was recorded every 0.1 ps to identify migration events, which appear as characteristic changes in the binding energy. The simulations reveal a clear temperature dependence of Ni mobility. Below 1200 K, the Ni exoatom remained localized near its initial adsorption site. Migration began at about 1200 K, although only occasional jumps were observed up to 1600 K. At 1700 K, transitions between neighboring adsorption sites became much more frequent, showing that increasing temperature strongly enhances Ni surface diffusion on C_{20}.

Reference:

1. E.C. Neyts, Bogaerts., Formation of endohedral Ni@ C60 and exohedral Ni-C60 metallofullerene complexes by simulated ion implantation, Carbon 47 (2009) 3177–3184, https://doi.org/10.1016/j.carbon.2008.12.023.
2. A.V. Verkhovtsev, S. Schramm, A.V. Solov'yov, Molecular dynamics study of the stability of a carbon nanotube atop a catalytic nickel nanoparticle, J. Phys. Chem. C 118 (2014) 16521–16529, https://doi.org/10.1021/jp503729v.
3. Prinzbach, H., Weiler, A., Landenberger, P., et al. Gas-phase production and photoelectron spectroscopy of the smallest fullerene, C_{20}. Nature 407, 60–63 (2000).
4. Shin, W. H., Yang, S. H., Goddard, W. A. III, Kang, J. K. Ni-dispersed fullerenes: Hydrogen storage and desorption properties. Applied Physics Letters 88, 053111 (2006).
5. Xueming Yang, Sihan Wu, Jiangxin Xu, Bingyang Cao, Albert C. To, Spurious heat conduction behavior of finite-size graphene nanoribbon under extreme uniaxial strain caused by the AIREBO potential, Phys. E. 96 (2018) 46–53, https://doi.org/ 10.1016/j.physe.2017.10.006.
6. G.M. Poletaev, I.V. Zorya, R.Yu. Rakitin, M.A. Iliina, Interatomic potentials for de scribing impurity atoms of light elements in fcc metals, Mater. Phys. Mech. 42 (4) (2019) 380–388, https://doi.org/10.18720/MPM.4242019_2.
7. L.A. Girifalco, V.G. Weizer, Application of the Morse potential function to cubic metals, Phys. Rev. 114 (1959) 687–690, https://doi.org/10.1103/ PhysRev.114.687.

MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF THE ADSORPTION OF C_{20} FULLERENE MOLECULE ON RECONSTRUCTED SILICON SI(001)-2×1 AND SI(111)-7×7 SURFACES

I.Z. Urolov[1, 2], I.D. Yadgarov[1], U.B. Khalilov[1]

[1]*Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies named after U.A. Arifov, Tashkent*
[2]*National University of Uzbekistan named Mirzo Ulugbek, Tahkent*
fizik25@mail.ru

Presently, the experimental and theoretical investigation of the interaction between carbon-based nanostructures, including fullerene molecules, and various surfaces has attracted significant interest. This is primarily due to the unique physical and chemical properties of these nanostructures and the resulting hybrid structures. For instance, configurations formed by the adsorption of the C_{20} fullerene molecule on Si(001) -2×1 and Si (111) -7×7 surfaces hold great potential for next-generation quantum computing architectures as solid-state qubits, specifically utilizing hydrogen atom encapsulation within a C_{20} fullerene adsorbed on a silicon substrate [1]. Consequently, computational simulations are crucial for exploring how C_{20} fullerene adsorption on various silicon crystallographic planes depends on surface morphology, surface reconstructions, defects, and specific adsorption configurations. In this study, the adsorption process of the C_{20} fullerene molecule on defect-free, reconstructed Si(001) -2×1 and Si (111) -7×7 surfaces was investigated using molecular dynamics simulations via the open-source LAMMPS software package [2]. The interatomic interactions governing the simulated system were described using the Erhard-Albe potential, which is an advanced refinement of the classical Tersoff potential [3].

The adsorption of the C_{20} molecule was simulated across several distinct configurations, including the dimer rows, trenches, and step edges of the Si(001) -2×1 surface, as well as the terrace sites and step edges of the Si (111) -7×7 substrate. The results revealed that the adsorption energy intervals for the C_{20} fullerene on the Si(001) -2×1 dimer rows, trenches, and step edges range from 1.53 to 7.46 eV, 1.35 to 7.29 eV, and 2.36 to 9.43 eV, respectively. For the Si (111) -7×7 surface and its step edges, the adsorption energies span from 1.52 to 8.31 eV and 3.39 to 6.09 eV, respectively. Although the energy intervals corresponding to the characteristic regions of both surfaces are quantitatively comparable, a comparative analysis of the individual adsorption configurations indicates that the fullerene molecule exhibits enhanced stability in the trench regions of the Si(001) -2×1 surface and archives maximum stability at the step edges. A similar conclusion can be drawn for the Si (111) -7×7 substrate, where fullerene adsorption at the step edges exhibits a distinctly chemisorptive character.

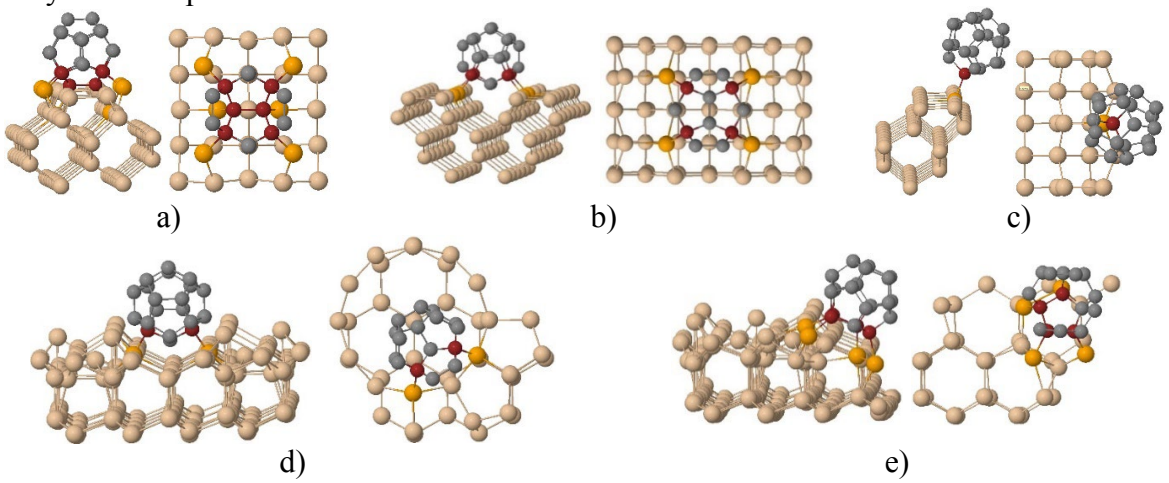


Fig. 1. Representative side and top views of the adsorption configurations of the C_{20} fullerene molecule: (a) on the dimer row, (b) within the trench, and (c) at the step edge of the Si(001) surface; and (d) on the terrace site and (e) at the step edge of the Si (111) surface.

In conclusion, the results demonstrate that the adsorption energy of the C_{20} fullerene molecule on Si(001) -2×1 and Si (111) -7×7 surfaces is highly dependent on the crystallographic orientation, surface reconstruction, and specific molecular configuration; notably, enhanced stability is observed within the trench regions of the Si(001) -2×1 surface and along the step edges of both substrates.

References

1. S. Park, D. Srivastava, K. Cho, MRS Online Proceedings Library (OPL), Volume 675: Symposium W – Nanotubes, Fullerenes, Nanostructured and Disordered Carbon , 2001 , W1.8.1, https://doi.org/10.1557/PROC-675-W1.8.1
2. Sandia National Laboratories, Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS), 2023, https://www.lammps.org/
3. P. Erhart and K. Albe, Physical Review B, 2025, 71, 035211-1-14. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.71.035211

НЕЛИНЕЙНАЯ ДИНАМИКА КРИСТАЛЛОВ СО СТРУКТУРОЙ B2: ДЕЛОКАЛИЗОВАННЫЕ МОДЫ И ДИСКРЕТНЫЕ БРИЗЕРЫ В CsCl, LiPb И NiTi

Д.У. Абдуллина[1], С.В. Дмитриев[2]

[1]*Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа*
[2]*Институт физики молекул и кристаллов Уфимского федерального исследовательского центра РАН, Уфа*
dina.abdullina25@gmail.com

Кристаллы со структурой B2 (тип CsCl) представляют собой важный класс материалов – от ионных соединений до интерметаллидов с памятью формы (NiTi) и перспективных сплавов (LiPb) [1]. Нелинейные колебательные эффекты, такие как дискретные бризеры (ДБ) – локализованные колебания большой амплитуды с частотами вне фононного спектра, – могут существенно влиять на теплопроводность, пластичность и другие свойства [2, 3]. Однако систематическое исследование ДБ в реальных кристаллах B2 с учётом реальных межатомных потенциалов до сих пор не проводилось.

В данной работе методом молекулярной динамики (МД) с многочастичными потенциалами EAM впервые рассчитаны амплитудно-частотные характеристики (АЧХ) делокализованных нелинейных колебательных мод (ДНКМ) для трёх кристаллов B2: CsCl (ионная связь), LiPb и NiTi (металлическая связь). На основе АЧХ предсказаны типы ДБ (щелевые или с частотой выше спектра) и в кристалле LiPb впервые обнаружен долгоживущий щелевой ДБ.

Детали моделирования: Моделирование выполнено в пакете LAMMPS с использованием потенциалов EAM [4–6]. Расчётная ячейка содержала 2×2×2 примитивных ячеек для исследования ДНКМ (16 атомов) и 20×20×20 для ДБ (16000 атомов), периодические граничные условия, ансамбль NVE, шаг 0,5 фс.

ДНКМ групп G1 – G7 (кроме G3, G4) возбуждались заданием начальных смещений согласно симметрии решётки [7]. Для каждой моды при амплитудах от 0 до 0,7 Å определялась частота колебаний по преобразованию Фурье. Для возбуждения ДБ на основе моды G1a применялась локализующая функция [8] с параметрами A_1, A_2, A_3, задаваемыми атомам одного ряда вдоль оси x. Стабильность ДБ оценивалась по временным рядам смещений центральных атомов.

Результаты Методом молекулярной динамики рассчитаны амплитудно-частотные характеристики ДНКМ для трёх кристаллов со структурой B2. В ионном кристалле CsCl, где отношение масс цезия и хлора составляет 3,75, обнаружена широкая запрещённая зона в диапазоне 6,51–8,88 ТГц. Все исследованные ДНКМ в CsCl демонстрируют жёсткий тип нелинейности, при котором частота возрастает с увеличением амплитуды. При этом моды группы G1, возбуждённые на лёгких атомах хлора, дают частоты выше верхней границы фононного спектра, а при возбуждении на тяжёлых атомах цезия – попадают в щель, что делает их кандидатами для создания как высокочастотных, так и щелевых дискретных бризеров. В интерметаллиде LiPb с очень большим различием масс (литий – 6,94 а.е.м., свинец – 207,2 а.е.м.) щель в спектре особенно широка – от 1,503 до 6,26 ТГц. Для этого кристалла характерна смешанная нелинейность: на подрешётке лития все моды имеют жёсткий тип, тогда как на подрешётке свинца при малых амплитудах преобладает мягкая нелинейность, которая при увеличении амплитуды сменяется жёсткой. Моды G1 на литии выходят за пределы спектра, а на свинце – лежат внутри щели, что позволяет возбуждать как обычные, так и щелевые ДБ. В сплаве NiTi с близкими массами никеля и титана щель в фононном спектре отсутствует. Лишь одна мода группы G6, возбуждённая на атомах никеля, проявляет жёсткую нелинейность и при достаточно больших амплитудах выходит выше фононного спектра, остальные моды остаются внутри непрерывного спектра. На основе моды G1a в кристалле LiPb на подрешётке свинца были возбуждены щелевые ДБ с

частотами 1,81 – 1,98 ТГц. Подбором параметров начальных смещений (A_1 = 0,55 Å, A_2 = 0,40 Å, A_3 = 0,15 Å) удалось получить высокостабильный ДБ с частотой 1,88 ТГц, который сохраняется без заметного затухания в течение 20 пс. Увеличение амплитуды приводит к появлению осцилляций и дрейфа бризера, а возбуждение на лёгкой подрешётке лития даёт короткоживущий ДБ с частотой выше спектра (8,57 ТГц), который затухает за 2 пс. Таким образом, именно LiPb, благодаря широкой запрещённой зоне и жёсткой нелинейности на больших амплитудах, оказывается наиболее подходящим для реализации долгоживущих щелевых бризеров, что согласуется с ранее наблюдавшимися эффектами в других кристаллах.

Обсуждение Наличие широкой запрещённой зоны (определяемой разницей масс) и жёсткий тип нелинейности являются ключевыми условиями для долгоживущих щелевых ДБ. В LiPb эти условия выполняются наилучшим образом. Сравнение с упрощённой моделью подтверждает необходимость учёта реальных межатомных потенциалов. Ранее ДНКМ и ДБ исследовались для многих кристаллов [7, 8], однако для семейства B2 такое систематическое исследование выполнено впервые.

Заключение Впервые проведено систематическое МД-исследование нелинейных колебательных мод в трёх реальных кристаллах B2. Установлены типы нелинейности и определены моды-кандидаты для возбуждения ДБ. В кристалле LiPb впервые обнаружен и охарактеризован долгоживущий щелевой ДБ. Результаты открывают путь для экспериментального поиска ДБ в этих материалах и исследования их влияния на тепловые и механические свойства [9].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда № 24-11-00139 «Тестирование и разработка новых межатомных потенциалов на основе точных решений нелинейных уравнений динамики решётки».

Литература

1. S. Ono, D. Kobayashi. Role of the M point phonons for the dynamical stability of B2 compounds. Scientific Reports, 2022, 12 7258.
2. S. Flach, A.V. Gorbach. Discrete breathers — Advances in theory and applications. Physics Reports, 2008, 467 1-116.
3. S.V. Dmitriev, E.A. Korznikova, J.A. Baimova, M.G. Velarde. Discrete breathers in crystals. Physics-Uspekhi, 2016, 59 446-461.
4. X.W. Zhou, F.P. Doty, P. Yang. Atomistic simulation study of atomic size effects on B1, B2, and B3 crystal stability of binary ionic compounds. Computational Materials Science, 2011, 50 2470-2481.
5. A.S. Al-Awad, L. Batet, L. Sedano. Parametrization of embedded-atom method potential for liquid lithium and lead-lithium eutectic alloy. Journal of Nuclear Materials, 2023, 587 154735.
6. H. Sharifi, C.D. Wick. Developing interatomic potentials for complex concentrated alloys of Cu, Ti, Ni, Cr, Co, Al, Fe, and Mn. Computational Materials Science, 2025, 248 113595.
7. G.M. Chechin, V.P. Sakhnenko. Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. Exact results. Physica D, 1998, 117 43-76.
8. S.A. Shcherbinin, Y.V. Bebikhov, D.U. Abdullina, et al. Delocalized nonlinear vibrational modes and discrete breathers in a body centered cubic lattice. Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation, 2024, 135 108033.
9. M.E. Manley. Impact of intrinsic localized modes of atomic motion on materials properties. Acta Materialia, 2010, 58 2926-2935.

ВЛИЯНИЕ СТЕПЕНИ КРИОГЕННОЙ ПРОКАТКИ НА СТРУКТУРУ И КОРРОЗИОННУЮ СТОЙКОСТЬ НИКЕЛЯ

Е.В. Автократова, О.Ш. Ситдиков, А.Х. Валеева, И.Ш. Валеев, Р.Р. Загитов, М.В. Маркушев

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
avtokratova@imsp.ru

Одним из эффективных способов упрочнения металлов и сплавов является термомеханическая обработка, основанная на интенсивной пластической деформации (ИПД), позволяющая формировать ультрамелкозернистые и наноструктурированные состояния. Среди различных схем ИПД особое место занимает прокатка в области криогенных температур, которая благодаря подавлению динамического возврата и рекристаллизации при низких температурах, обеспечивает накопление существенно более высокой плотности дефектов кристаллического строения по сравнению с деформацией при комнатной температуре. Это открывает возможности для достижения уникальных механических характеристик, однако эффект криогенной прокатки (КП) на комплекс служебных свойств получаемых полуфабрикатов остается все еще дискуссионным, в том числе из-за немногочисленности исследований их коррозионной стойкости.

Измельчение кристаллитов (зерен и субзерен) общепринято считать одним из основных структурных факторов, контролирующих коррозионную стойкость металлов и сплавов [1]. Однако в литературе довольно редко можно обнаружить результаты достоверно подтверждающие этот эффект для наноструктурированных материалов, причем даже для чистых металлов. Основная сложность заключается в том, что коррозионное поведение таких материалов определяется не только размером кристаллитов, а целым комплексом структурных факторов: плотностью и типом дефектов (вакансий, дислокаций, границ), однородностью их распределения в объеме, уровнем микроискажений и текстурой. Вклад каждого из этих факторов может изменяться в зависимости от степени деформации, что будет оказывать различное влияние на коррозионное поведение материала.

Цель работы – на примере чистого никеля установить взаимосвязь между эволюцией дефектной структуры и электрохимическим поведением металла, подвергнутого криогенной прокатке с различной степенью деформации.

Заготовки диаметром 90х100 мм никеля марки НП2 были предварительно осажены со степенью деформации 80% при температуре 850°С. Для уменьшения остаточных напряжений и стабилизации структуры их затем подвергли 2-х часовому отжигу при 600°С с охлаждением на воздухе. Прокатку до суммарных степеней в интервале 30-90% проводили в изотермических условиях при температуре жидкого азота на лабораторном шестивалковом стане в направлении перпендикулярно оси осадки. Изотермические условия обеспечивали предварительной выдержкой заготовок и рабочих валков в ванне с жидким азотом [2]. Рентгеноструктурный анализ (РСА) проводили в режиме симметричного Θ–2Θ сканирования с использованием параллельного пучка излучения CuKα (40 kV, 40 mA). Расчет параметров кристаллической структуры (размера областей когерентного рассеяния D, микроискажений ε, плотности дислокаций ρ, параметра анизотропии уширения q, периода решетки *a*) выполняли по модифицированному методу Вильямсона–Холла [3]. Тип дислокаций определяли по значению параметра q. Текстурный анализ проводили по результатам оценки интегральных интенсивностей отражений (111), (200) и (220) относительно случайного распределения (значения Max и Min). Методом сканирующей электронной микроскопии дифракции обратно-рассеянных электронов (СЭМ-EBSD) оценивали параметры структуры в плоскости листа, включая локальные разориентировки (Local Average Misorientation, LAM) и долю двойниковых границ (Σ3+Σ9). Электрохимические испытания проводили с использованием потенциостата Elins P-2X в трехэлектродной ячейке при скорости развертки

потенциала 100 мВ/с в интервале потенциалов от -0.5 до +0.6В в растворе 0.1М H_3BO_3 + 0.025М $Na_2B_4O_7$ (pH ~ 8.4). Полученные данные обрабатывали в программе ES8 (Elins). Коррозионный ток (I_{cor}) определяли методом экстраполяции Тафелевских участков, скорость коррозии (СК) рассчитывали по стандартной методике.

Перед прокаткой структура никеля представляла собой поликристалл с практически равновесной кристаллической решеткой и размером зерна ~ 40 мкм. Размер областей когерентного рассеяния превышал 800 нм, микроискажения были минимальны (0.015%), плотность дислокаций низкая (1×10^{13} м$^{-2}$). Параметр q=2.05 указывал на смешанный тип дислокаций, которые статистически были распределены по объему и не образовывали явные элементы субструктуры. При этом отмечали выраженную текстурную анизотропию (максимум в направлении (220) достигал 5.77), унаследованную от предварительных этапов обработки. По данным EBSD, доля двойниковых границ Σ3+Σ9 составляла 9.6%, а средняя локальная разориентировка Θ_{ave}=0.28°. Такое структурное состояние, вероятно, способствовало равномерной пассивации поверхности образца и обеспечению умеренной коррозионной стойкости никеля с I_{cor}=334 нА, СК=1.68 мм/год (Таблица 1).

После 30% КП наблюдалось начало формирования дислокационной структуры преимущественно винтового типа. Доля двойников снижалась до 2.5%, Θ_{ave} возрастала до 1.08°. Эффект низкой температуры обработки на этом этапе подавил переползание дислокаций и активизировал поперечное скольжение, что привело к размытию исходной текстуры. На этом этапе пересечения между винтовыми дислокациями были редки, краевые пороги-единичны и невысоки, поэтому накопления точечных дефектов не происходило, период решётки не рос. Плотность дислокаций увеличилась на порядок, несмотря на это, ток коррозии уменьшился на 20% по сравнению с исходным состоянием до минимального значения 267 нА (Таблица 1). Причина - плотность точечных дефектов еще не достигла критической величины, оказывающей влияние на параметры коррозии, а перераспределение ориентаций зерен и сравнительно однородная плотность линейных дефектов выровняли электрохимический потенциал на контактной поверхности.

После обжатия 50% фиксировали «предкритическое» деформационное состояние, характеризуемое плотностью, преимущественно винтовых, дислокаций около 4×10^{14} м$^{-2}$, и аномально высоким параметром решетки (a = 3.52543 Å). Оба фактора свидетельствовали о лавинной генерации точечных дефектов (вакансий и межузельных атомов) в решетке из-за низкой скорости диффузии. Физическая причина этого явления - генерация точечных дефектов при взаимодействии винтовых дислокаций с образованием краевых порогов, которые при криогенной температуре не способны переползать и при движении генерируют вакансии и межузельные атомы. По данным EBSD, доля двойниковых границ снижалась до 1.0%, Θ_{ave} возрастала до 1.47°. В результате это состояние характеризовалось пиком коррозионной активности: ток I_{cor} достигал 471 нА, а скорость коррозии – 2.68 мм/год (Таблица 1). Сформировавшиеся многочисленные точечные дефекты в этом случае могли выступать в качестве центров питтинга и нарушать целостность пассивного слоя, создавая локальные поля растяжения и пробои.

После деформации 70% происходило качественное изменение структуры за счет изменения механизма деформации с поперечного скольжения винтовых дислокаций на фрагментацию с образованием ячеистой структуры. Это подтверждалось сменой типа дислокаций с винтовых на смешанные и краевые, а также резким ростом их плотности до $1.1\cdot10^{15}$ м$^{-2}$. При этом период решетки возвращался к исходному уровню (3.52297 Å). Это указывало на массовую аннигиляцию точечных дефектов при их взаимодействии с формирующимися границами фрагментов. По данным EBSD, доля двойников снижалась до минимального значения 0.7%, Θ_{ave} возрастала до 1.53°. В результате коррозионные свойства снова улучшились (Таблица 1): I_{cor} снизился до 406 нА, а потенциал сместился в положительную область (E = -231 мВ). Дислокационные стенки, являясь каналами диффузии, в данном случае не оказали столь сильного негативного влияния, как скопления точечных дефектов.

Таблица 1. Показатели электрохимической коррозии никеля

Состояние	I_{cor}, нА	E, мВ	I, мкА/см^2	СК, мм/год
исходное	334.46	-297.1	1.97	1.68
КП 30%	267.33	-312.8	1.34	1.14
КП 50%	471.36	-307.8	3.14	2.68
КП 70%	405.73	-231.8	2.7	2.31
КП 90%	673.23	-356.3	4.49	3.83

После КП до 90% доля двойниковых границ по данным EBSD возрастала до 1.2%, что было связано со снижением количества высокоугловых границ в полях зрения при экстремальном раскатывании исходных зерен. Формировалась устойчивая ячеисто-фрагментированная структура с преимущественной ориентацией фрагментов вдоль плоскости {111} (текстурный максимум достигал 7.17). Несмотря на это, никель показал наименьшую коррозионную стойкость: I_{cor} достигал 673 нА, скорость коррозии – 3.83 мм/год (в 2.3 раза хуже исходного состояния). Вероятно, это было связано с тем, что границы фрагментов приобретали сильно неравновесную разупорядоченную структуру с высокой свободной энергией, и выступали эффективными анодными участками. Кроме того, низкой стойкости могло способствовать нарушение сплошности пассивной пленки в момент релаксации высоких накопленных микронапряжений (LAM до 4.5° с Θ_{ave}=1.92^o).

ВЫВОДЫ

1. Установлено, что зависимости параметров коррозионной стойкости от степени криогенной прокатки крупнозернистого никеля имеют немонотонный характер.
2. КП до 30% способствует максимальному повышению коррозионной стойкости никеля с током коррозии I_{cor} = 267 нА и вызвано формированием деформационной структуры с низкой плотностью дефектов на начальной стадии формирования текстуры прокатки.
3. Ухудшение коррозионной стойкости никеля при 50% КП обусловлено накоплением точечных дефектов (вакансий и межузельных атомов), которые служат центрами питтинга.
4. Обнаружен эффект частичного восстановления коррозионной стойкости после КП до 70%, вызванный аннигиляцией точечных дефектов на границах формирующейся ячеистой структуры и сменой типа дислокаций.
5. Деформация до 90% приводит к резкому падению коррозионной стойкости из-за развития неравновесных границ и высоких внутренних напряжений.

Исследования проводили в рамках государственного задания ИПСМ РАН. Работы проведены на базе Центра коллективного пользования ИПСМ РАН «Структурные и физико-механические исследования материалов».

Литература

1. B.V. Mahesh, R.K.S. Raman. Role of Nanostructure in Electrochemical Corrosion and High Temperature Oxidation: A Review. Metall. Mater. Trans. A, 2014, 45, 5799–5822.
2. M.V. Markushev, I.S. Valeev, E.V. Avtokratova, R.R. Ilyasov, A.K. Valeeva, S.V. Krimsky, O.S. Sitdikov. Effect of strain of cryorolling on structure and strength of nickel. Lett. Mater., 2022, 12(4s), 409–413.
3. T. Ungar, S. Ott, P.G. Sanders, A. Borbely, J.R. Weertman. Dislocations, grain size and planar faults in nanostructured copper determined by high resolution x-ray diffraction and a new procedure of peak profile analysis. Acta Mater, 1998, 46, 3693–3699.

МИКРОСТРУКТУРА И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СТАБИЛЬНОЙ АУСТЕНИТНОЙ СТАЛИ ПОСЛЕ КРИОГЕННОЙ И ПОСЛЕДУЮЩЕЙ ТЕПЛОЙ ПРОКАТКИ ПРИ 600 °С

С.А. Аккузин, Н.А. Полехина, А.В. Ким, И.Ю. Литовченко

Институт физики прочности и материаловедения им. В.Е. Панина СО РАН, Томск
s.akkuzin@ispms.ru

С использованием метода дифракции обратно-рассеянных электронов (EBSD), просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) и рентгеноструктурного анализа (РСА) было исследовано влияние криогенной и последующей теплой прокатки при 600 °С на микроструктуру и фазовые превращения в аустенитной стали 03Х17Н14М3. Механические свойства определены при испытаниях на одноосное растяжение при комнатной температуре.

Исходное состояние стали получено путем термической обработкой, включающей отжиг при 1100 °С в течение 1 ч с последующей закалкой в воде. Согласно данным EBSD, в этом состоянии сталь состоит из аустенитных зерен со средним размером ≈ 35,8 мкм. Внутри аустенитных зерен выявлено множество специальных границ Σ3 (двойников отжига). С учетом двойниковых границ средний размер зерна аустенита составляет ≈ 16,6 мкм. Для исходного состояния характерны следующие механические свойства: предел текучести 291 ± 10 МПа, предел прочности 634 ± 7 МПа, относительное удлинение 56,6 ± 10,3%.

Криогенную прокатку проводили в несколько проходов с промежуточным охлаждением образцов стали до температуры, близкой к температуре кипения жидкого азота (-196 °С). Общая степень деформации составила ε = 20%. Последующую теплую прокатку выполняли в 2 прохода (ε = 40%) с предварительным нагревом до 600 °С. Перед первым проходом образцы выдерживали в печи в течение 10 минут, после второго – 5 минут.

Электронно-микроскопические исследования и РСА показали, что криогенная прокатка вызывает интенсивное механическое двойникование и образование небольшого количества α'-мартенсита. Анализ EBSD карт и ПЭМ изображений выявил, что α'-мартенсит (около 1,3%) формируется преимущественно вблизи границ аустенитных зерен и в местах пересечения микродвойников. При этом доля специальных границ существенно снижается за счет их трансформации в границы общего типа. Карты KAM демонстрируют значительный рост плотности дислокаций по сравнению с исходным состоянием. В результате криогенной прокатки достигнуты высокие прочностные свойства: предел текучести 967 ± 70 МПа, предел прочности 1149 ± 76 МПа при относительном удлинении 7,9 ± 1,3%.

Последующая теплая прокатка при 600 °С приводит к дальнейшему накоплению дислокаций и фрагментации зерен. По данным EBSD, в структуре формируются равноосные аустенитные зерна размером менее 1 мкм. Фазовый анализ показал, что доля α'-мартенсита снижается до 0,2%, что свидетельствует об обратном превращении $\alpha' \rightarrow \gamma$. Благодаря относительно невысокой температуре деформации микродвойниковая структура в большинстве зерен сохраняется, при этом формируются полосы локализации деформации (полосы сдвига). ПЭМ исследования выявили, что эти полосы состоят из наноразмерных фрагментов аустенита и α'-мартенсита. В результате теплой прокатки прочностные свойства дополнительно возрастают: предел текучести 1128 ± 56 МПа, предел прочности 1289 ± 86 МПа, а относительное удлинение 6,6 ± 1,8%. Дальнейшее повышение пластичности возможно за счет применения релаксационных отжигов.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема № FWRW-2026-0005.

ОЦЕНКА АНИЗОТРОПИИ МАГИСТРАЛЬНОГО НЕФТЕПРОВОДА ПУТЕМ АНАЛИЗА МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПРИ РАСТЯЖЕНИИ

Н.М. Альсаймари, В.А. Хотинов

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
mnardeenn@gmail.com

Магистральные нефтегазопроводы работают в условиях высокого внутреннего давления и сложного напряжённо-деформированного состояния, что требует применения высокопрочных трубных сталей с оптимальным сочетанием прочности, пластичности и сопротивления разрушению. Одним из широко используемых материалов для изготовления труб большого диаметра является сталь API 5L X80, обладающая высоким уровнем механических свойств и эксплуатационной надежностью [1,2].

В процессе контролируемой прокатки и термомеханической обработки в стали формируется направленная структура, которая может приводить к различию механических свойств в зависимости от направления относительно прокатки. Данное явление проявляется в виде механической анизотропии и влияет на развитие пластической деформации, локализацию повреждений и процесс разрушения материала [3–5].

Учет анизотропии механических свойств является важным фактором при оценке надежности магистральных нефтегазопроводов, поскольку направление деформации может влиять на распределение напряжений и сопротивление материала разрушению при эксплуатационных нагрузках [2,4].

Одним из эффективных методов исследования анизотропии является испытание на растяжение образцов, вырезанных в различных направлениях относительно прокатки. Анализ параметров пластичности и характера разрушения позволяет определить особенности деформационного поведения материала [6].

Целью настоящей работы является оценка механической анизотропии стали API 5L X80 на основе анализа поведения материала при растяжении, характера разрушения и формы шейки образцов, вырезанных в направлениях НП0, НП45 и НП90, а также оценка значимости полученных результатов для обеспечения надежности магистральных нефтегазопроводов.

Материалом исследования являлась низкоуглеродистая трубная сталь класса прочности X80 со следующим химическим составом, мас. %: 0,05 C; 1,81 Mn; 0,22 Mo; 0,02 V; 0,05 Nb; 0,02 Ti. Испытания на одноосное растяжение проводили в соответствии с ГОСТ 1497–2023 на испытательной машине Instron 8801. Для исследований использовали стандартные цилиндрические образцы диаметром 5 мм и длиной рабочей части 25 мм, вырезанные из листового проката в трех направлениях относительно направления прокатки: вдоль направления прокатки (НП0), под углом 45° (НП45) и перпендикулярно направлению прокатки (НП90).

В процессе испытаний оценивали особенности пластического деформирования и характер разрушения образцов в зависимости от направления вырезки относительно направления прокатки.

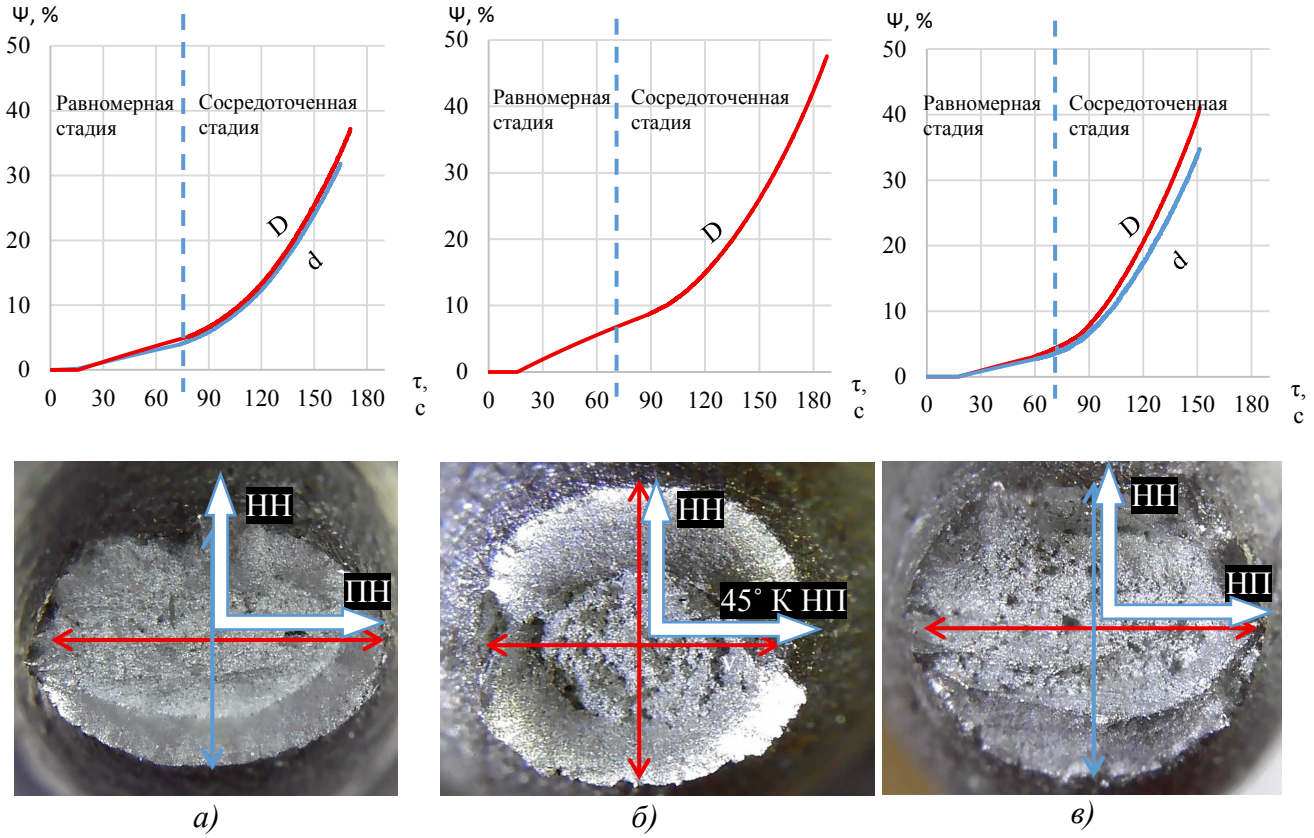
Полученные зависимости (рис. 1) показывают, что деформирование всех исследованных образцов проходит две последовательные стадии: равномерную пластическую деформацию и последующую локализацию деформации с формированием шейки перед разрушением. На начальном этапе изменение относительного сужения Ψ происходит постепенно, что связано с равномерным распределением деформации в рабочей части образца. После достижения максимальной нагрузки наблюдается ускоренное изменение Ψ вследствие концентрации деформации в зоне шейки.

Продолжительность стадии равномерной деформации зависит от направления вырезки образцов. Время достижения максимальной нагрузки составило 68,15 с для НП0, 75,50 с для НП45 и 60,65 с для НП90. Наибольшее значение для НП45 указывает на более

продолжительное развитие пластической деформации перед локализацией и более равномерное деформационное поведение.

Анализ формы шейки после разрушения выявил зависимость характера локализации деформации от направления прокатки. Для образцов НП0 и НП90 наблюдается овальная форма шейки: для НП0 значения диаметров составили D=3,0 мм и d=2,8 мм, а для НП90 – D=2,6 мм и d=2,2 мм. В образце НП45 сформировалась шейка, близкая к круглой форме, с минимальным диаметром d=2,5 мм, что указывает на более равномерное распределение деформации перед разрушением.

Выявленные различия связаны с особенностями формирования структуры стали при контролируемой прокатке и термомеханической обработке. Направленность структуры приводит к различию сопротивления пластической деформации в зависимости от ориентации относительно прокатки, что является проявлением механической анизотропии стали API 5L X80.



а) *б)* *в)*

Рис. 1. Кривые изменения относительного сужения ψ на разных стадиях деформации и поверхности разрушения шейки в образцах стали X80, ориентированных вдоль НП (*а*), под углом 45° к НП (*б*) и под углом 90° к НП (*в*).

На рис. 2 показано влияние направления вырезки образцов на пластические свойства стали API 5L X80. Максимальное значение относительного сужения получено для направления НП45 и составило 48,85 %, тогда как для НП0 и НП90 данный параметр равен 37,16 % и 41,12 % соответственно. Более высокое значение Ψ для НП45 указывает на способность материала воспринимать большую пластическую деформацию перед разрушением, что согласуется с более симметричной формой шейки, наблюдаемой на рис. 1.

Для количественной оценки изменения формы шейки после разрушения был использован коэффициент анизотропии: R= d/D, где d — минимальный диаметр шейки после разрушения, мм, D — максимальный диаметр шейки, мм.

Значения коэффициента R для НП0, НП45 и НП90 составили 0,95; 1,00 и 0,94 соответственно. Значение R, близкое к единице для НП45, характеризует формирование практически круглой шейки и более равномерное распределение деформации. Снижение R

для НП0 и НП90 связано с образованием овальной формы шейки и различным развитием локализованной деформации, что подтверждает наличие механической анизотропии стали API 5L X80.

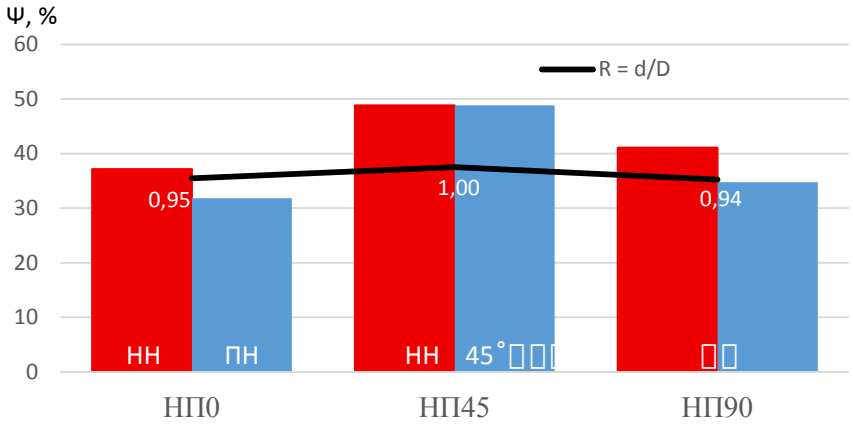


Рис. 2. Величина относительного сужения Ψ и коэффициент анизотропии R = d/D образцов с разной ориентацией относительно НП (НП0, НП45, НП90).

Установлено, что направление вырезки образцов оказывает существенное влияние на характер пластического деформирования и разрушения стали API 5L X80. Наиболее равномерное развитие деформации наблюдается для направления НП45, для которого получены максимальное относительное сужение Ψ = 48,85 % и коэффициент формы шейки R = 1,00.

Для направлений НП0 и НП90 выявлено формирование овальной формы шейки и снижение коэффициента R до 0,95 и 0,94 соответственно, что указывает на различия в локализации пластической деформации и подтверждает влияние направления прокатки на механическое поведение материала.

Полученные результаты подтверждают наличие механической анизотропии стали API 5L X80, связанной с особенностями структуры, сформированной в процессе прокатки. Выявленные различия в деформационном поведении необходимо учитывать при оценке работоспособности и надежности магистральных нефтегазопроводов, поскольку они могут влиять на распределение деформации, развитие локальных повреждений и сопротивление трубопровода разрушению при эксплуатационных нагрузках.

Литература

1. API Specification 5L. Line Pipe. 46th ed. Washington, DC: American Petroleum Institute, 2018, 206 p.
2. M.L. Lobanov, V.A. Khotinov, V.N. Urtsev, S.V. Danilov, N.V. Urtsev, S.I. Platov, S.I. Stepanov. Tensile Deformation and Fracture Behavior of API-5L X70 Line Pipe Steel. Materials, 2022, 15(2), 501.
3. M. Zhou, L. Du, X. Liu. Microstructure and Mechanical Properties of X80 Pipeline Steels in Different Cooling Schedules. Acta Metallurgica Sinica (English Letters), 2010, 23(3), 171–175.
4. M. Masoumi, L.F.G. Herculano, H.F.G. de Abreu. Study of Texture and Microstructure Evaluation of Steel API 5L X70 under Various Thermomechanical Cycles. Materials Science and Engineering: A, 2015, 639, 550–558.
5. Q. Wu, S. He, P. Hu, Y. Liu, Z. Zhang, C. Fan, R. Fan, N. Zhong. Effect of finish rolling temperature on microstructure and mechanical properties of X80 pipeline steel by on-line quenching. Materials Science and Engineering: A, 2023, 862, 144496.
6. L.B. Godefroid, B.M. Sena, V.B. da Trindade Filho. Evaluation of Microstructure and Mechanical Properties of Seamless Steel Pipes API 5L Type Obtained by Different Processes of Heat Treatments. Materials Research, 2017, 20(2), 514–522.

СОЗДАНИЕ ML-ПОТЕНЦИАЛА КЛАССИЧЕСКОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ (LAMMPS) НА БАЗЕ MLIP ДЛЯ ОБЪЕМНОГО КРИСТАЛЛА ReS_2

Д.В. Алябьев, И.Д. Ядгаров
Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН, Республика Узбекистан
wside2008@mail.ru

Халькогениды переходных металлов изучаются достаточно давно — с середины прошлого века. Отдельной подгруппой таких соединений, представляющих научный и практический интерес, являются т. н. **дихалькогениды переходных металлов (transition metal dichalcogenide, (TMD)).** Они представляют собой один из перспективных классов двумерных материалов. В отличие от графена, с нулевой запрещенной зоной, многие TMD обладают выраженными полупроводниковыми свойствами, что делает их идеальными кандидатами для электроники и оптоэлектроники нового поколения [1,2].

Одним из представителей этого класса соединений является ReS_2. К настоящему времени, формирование потенциала классической молекулярной динамики для подобных соединений стандартными подходами остается сложной задачей. Развитие методов машинного обучения позволяет на основе ограниченного объема квантомеханических расчетов сформировать потенциал, который будет рассчитывать такие сложные структуры за характерные для классической МД времена. Программный пакет MLIP (Machine Learning Interatomic Potentials, [3]) создает межатомные потенциалы на основе методов машинного обучения с последующим их применением в классической МД.

Работа состояла из трех основных стадий — создание обучающего датасета на базе квантомеханического пакета Quantum Espresso (QE), обучение потенциала на базе MLIP, проверка работоспособности обученного потенциала в LAMMPS. В QE были получены три датасета: в термостате NVT (600K) предварительно релаксированная ячейка из двух слоев ReS2 (элементарная ячейка из 24 атомов) — 510 кадров, затем VC_MD - 100 кадров и, наконец, случайно деформированные ячейки (scf расчет) — 30 кадров. Были использованы скалярные релятивистские потенциалы. Затем кадры были перемешаны случайным образом и запущено обучение MLIP (шаблон 16.mtp). Обученный потенциал дал приемлемые ошибки при валидации энергии и сил, завышенную ошибку при валидации компонентов тензора напряжений. Последующая минимизация энергии, размноженной на 3×3×3 ячейки дала устойчивый результат, объем элементарной ячейки в пересчете составил 420Å^3 (8.06г/см3), затем был запущен расчет в термостате NVT. Расчет в термостате NVT (T=600K) показал здоровые осцилляции давления. Однако, последующий расчет в термостате NPT (T=600K) дал динамику снижения объема ячейки (8.07г/см3), что существенно выше, чем в литературе (рис. 1).

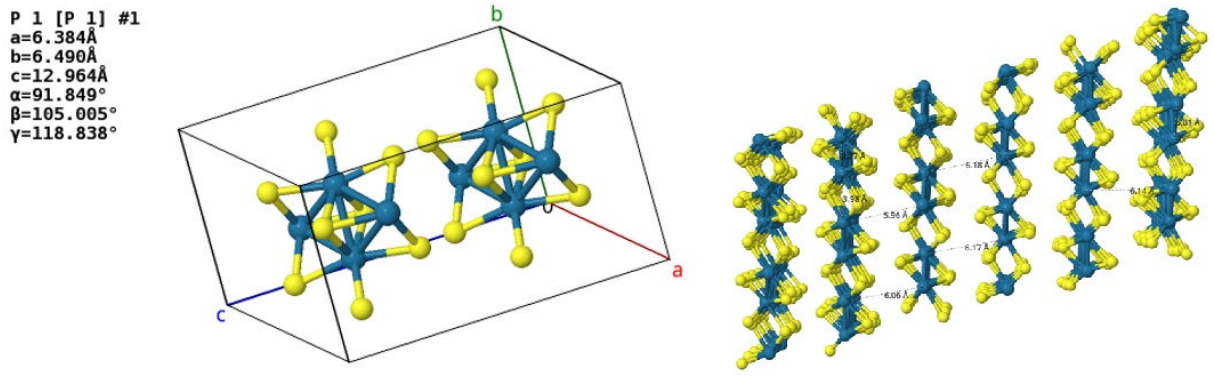


Рис. 1. Слева — элементарная ячейка ReS2 (два слоя, 24 атома) после релаксации в QE, справа — релаксированная в LAMMPS структура суперячейки 3×3×3, 600K, 50пс

Как показали визуальные оценки, это произошло видимо по причине уплотнения слоев ReS_2. Цепочки рения и серы при этом сохраняют свою стандартную геометрию.

Различные тестовые прогоны в LAMMPS полученного ML потенциала позволяют надеяться, что компенсация излишнего послойного сжатия структуры возможна регулированием относительных весов энергия-силы-тензор напряжений и увеличением размеров расчетного кристалла, что в свою очередь позволит осуществление расчетов классической МД в LAMMPS структур ReS_2.

Литература

1. Haoyue Lu, Yan Wang, Xuchen Han, Jing Liu, ACS Nano 2024, 18, 34, 23403–23411
2. Liu, L., Wang, H., Wu, Q. et al., Nano Res. **15**, 5443–5449 (2022)
3. Ivan S Novikov *et al* 2021 *Mach. Learn.: Sci. Technol.* **2** 025002

ИССЛЕДОВАНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ И МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СПЛАВА TI-45NI-5CU ПОСЛЕ РКУП

А.Р. Арсланов[1], **А.А. Чуракова**[1, 2]

[1]*Уфимский университет науки и технологий, Уфа*
[2]*Институт физики молекул и кристаллов – обособленное структурное подразделение Уфимского федерального исследовательского центра РАН, Уфа*
arslanov.h20@mail.ru

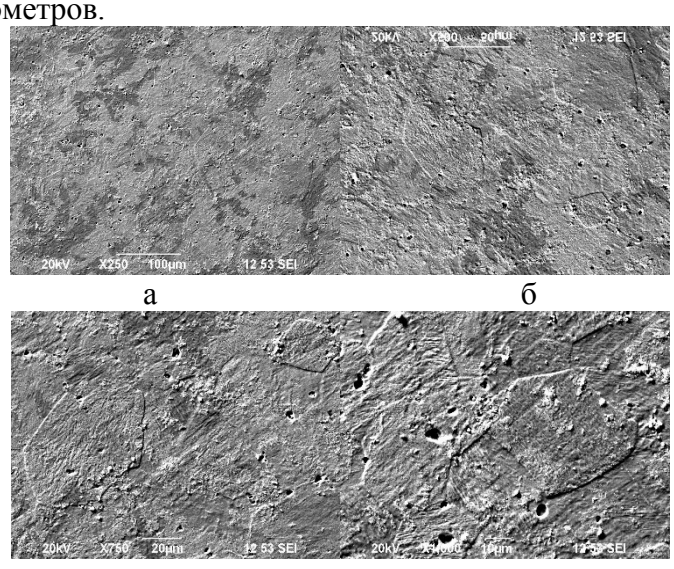
Передовые функциональные материалы на основе сплава NiTi нашли широкое применение в аэрокосмической и биомедицинской областях из-за превосходного эффекта памяти формы и высокой сверхэластичности. Преимущества замены Ni медью заключаются в сужении спектра превращений, снижении зависимости температур превращения от химического состава, уменьшении температуры гистерезиса, более стабильных температурах фазовых переходов, улучшении реакционной способности, коррозионной стойкости и др. по сравнению с бинарным составом, не содержащим медь [1, 2, 3].

В данной работе проводилось исследование сплава $Ti_{50}Ni_{45}Cu_5$, подвергнутого РКУП, с целью выявления влияния интенсивной пластической деформации (ИПД) на микроструктуру, микротвёрдость и механические свойства материала.

Был исследован сплав $Ti_{50}Ni_{45}Cu_5$ в 3 состояниях: закалка (ЗАК) – закалка с температуры 900°С в воде, РКУП-1 – закалка 900°С + 2 прохода РКУП при температуре 500°С, после РКУП-2 – закалка 900°С + 2 прохода РКУП при температуре 500°С + 2 прохода РКУП при температуре 450°С.

Для исследования микроструктуры сплав был подвергнут полировке с последующим травлением в растворе HNO_3:HF:$C_3H_8O_3$ с содержанием 16% азотной и 16% плавиковой кислоты, время травления одного образца составило 3 минуты. Исследование микротвёрдости проводилось с количеством точек на каждый образец 15–17, шагом 0,5 мм при нагрузке 0,2HV по Виккерсу и времени нагружения 10 секунд. Испытания на растяжение проходили со скоростью 0,24 мм/мин. Испытания проводились для 2 состояний закалка и РКУП.

На Рис. 1 предоставлены снимки структуры, полученные методом РЭМ, сплава $Ti_{50}Ni_{45}Cu_5$ после закалки. Образец имеет равноосную зёренную структуру, средний размер зерна составил 130 микрометров.

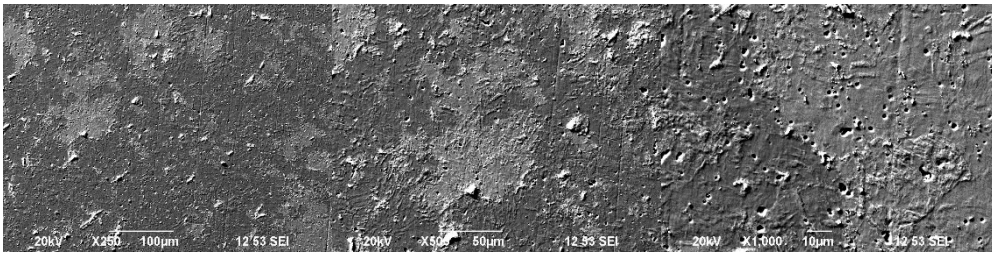


а б

в г

Рис. 1. Микроструктура сплава $Ti_{50}Ni_{45}Cu_5$ в состоянии ЗАК с увеличением: а) X250, б) X500, в) X750, г) X1000

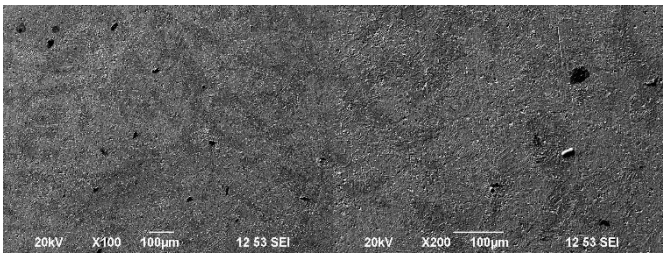
На Рис. 2 предоставлены снимки микроструктуры сплава $Ti_{50}Ni_{45}Cu_5$ в состоянии РКУП-1. Наблюдается относительно небольшое количество мартенситных пластинок, границы зёрен выявить не удалось.



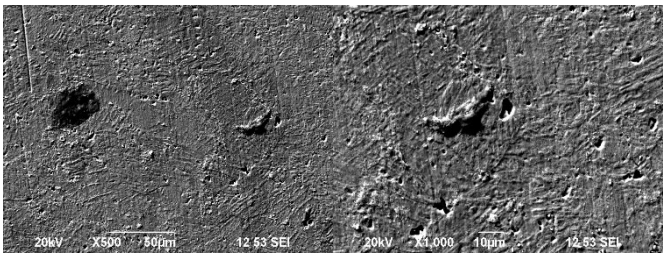
а б в

Рис. 2. Микроструктура сплава $Ti_{50}Ni_{45}Cu_5$ в состоянии РКУП-1 с увеличением: а) Х250, б) Х500, в) Х1000

На рисунке 3 представлены снимки микроструктуры сплава $Ti_{50}Ni_{45}Cu_5$ в РКУП-2 состоянии. В структуре наблюдается ярко выраженный мартенситный рельеф в виде мартенситных пластин в границах аустенитных зёрен, но, вероятное значительное измельчение зёренной структуры не позволяет выявить четкие границы, что затрудняет измерение среднего размера зерна.



а б



в г

Рис. 3. Микроструктура сплава $Ti_{50}Ni_{45}Cu_5$ в состоянии РКУП-2 с увеличением: а) Х100, б) Х200, в) Х500, г) Х1000

Из снимков можно сделать вывод, что после проведения РКУП уже на этапе РКУП-1 зерно значительно было измельчено и его не видно на снимках. Микроструктуры сплава после 4 и после 2 проходов РКУП отличаются тем, что у РКУП-2 более выражен мартенситный рельеф.

По результатам механических испытаний были построены графики, представленные на рисунке 4 в координатах «Напряжение–деформация» для исследуемых состояний сплава $Ti_{50}Ni_{45}Cu_5$.

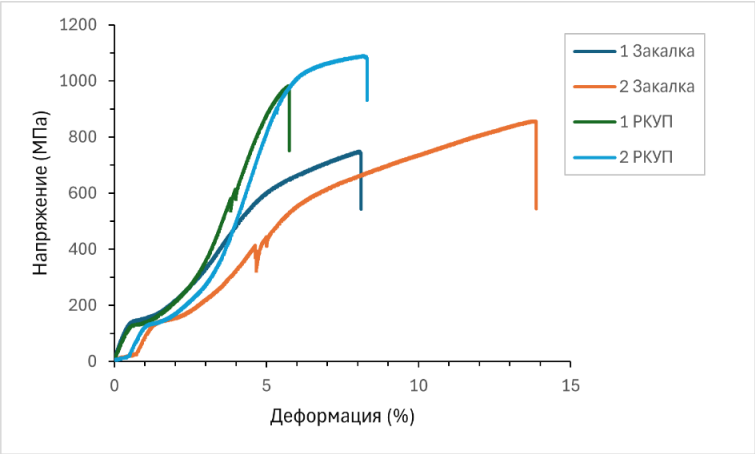


Рис. 4. Кривые растяжения сплава $Ti_{50}Ni_{45}Cu_5$

Видно, что после РКУП образцы имеют большую прочность, но уступают исходным образцам в пластичности. Среднее значение предела прочности в состоянии после закалки – 800 МПа±25МПа, а после РКУП – 1040 МПа±30МПа.

На рисунке 5 представлены гистограммы микротвёрдости в зависимости от состояния. В среднем значения микротвёрдости составили: ЗАК – 208HV±19HV, РКУП-1 – 219HV±20HV, РКУП-2 – 254HV±23HV.

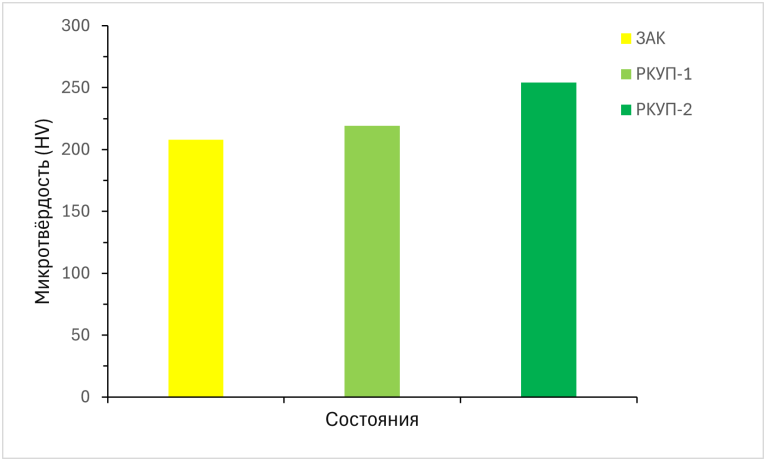


Рис. 5. Гистограмма микротвёрдости образцов с различной обработкой

Исходя из анализа результатов измерения микротвердости наблюдается повышение значений в состояниях после РКУП, что связано с уменьшением размера зёрен и повышения плотности дефектов.

Литература

1. Yi-Ting Hsu, Cheng Tien Wu, Chih-Hsuan Chen. Nanoscale-precipitate-strengthened (Ni,Cu)-rich TiNiCu shape memory alloy with stable superelasticity and elastocaloric performance. Journal of Alloys and Compounds, 2024, 997, 174937.
2. C. Yang, Q.R. Cheng, L.H. Liu, Y.H. Li, Y.Y. Li. Effect of minor Cu content on microstructure and mechanical property of NiTiCu bulk alloys fabricated by crystallization of metallic glass powder. Intermetallics, 2015, 56, 37-43.
3. S. Shiva, N. Yadaiah, I.A. Palani, C.P. Paul, K.S. Bindra. Thermo mechanical analyses and characterizations of TiNiCu shape memory alloy structures developed by laser additive manufacturing. Journal of Manufacturing Process, 2019, 48, 98-109.

АНАЛИЗ ПАРАМЕТРОВ ТЕРМОУПРУГОГО ГЦК-ГПУ МАРТЕНСИТНОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ В МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СПЛАВАХ $(Co_{35}Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20}Ni_5)_{100-x}Si_x$ (x = 0, 1, 3, 5)

Д.О. Астапов, Л.В. Данилова, Е.Г. Астафурова

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск
denis.0612@mail.ru

Сплавы с эффектом памяти формы $Co_{40-x}Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20}Ni_x$, испытывающие термоупругие ГЦК-ГПУ мартенситные превращения (МП), представляют собой новый класс функциональных многокомпонентных материалов. Они способны конкурировать с известными сплавами на основе TiNi, поскольку имеют более низкую стоимость [1]. На данный момент текстурированный поликристаллический сплав $Co_{35}Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20}Ni_5$ (со средним размером зерна d = 730 мкм) проявил максимальный эффект памяти формы (ЭПФ) при испытании на растяжение, равный 4,7 %, но поликристаллы с разориентированной структурой демонстрируют лишь ≈ 2 % обратимой деформации [2]. Ресурс ЭПФ можно увеличить разными способами, одним из которых является легирование кремнием [3, 4]. Оно позволяет, во-первых, упрочнить высокотемпературную ГЦК-фазу, чтобы подавить ее пластическое течение в процессе образования мартенсита при охлаждении и под напряжением [3, 4]. Во-вторых, легирование кремнием снижает энергию дефекта упаковки (ЭДУ) и способствует уменьшению температурного гистерезиса МП [3, 4]. В-третьих, кремний минимизирует изменение объема между высокотемпературной и низкотемпературной фазами [4]. Ранее эти закономерности были установлены для сплавов на основе железа [3 – 5]. Z. Guo с соавторами в работе [5] описал феноменологическую модель ГЦК-ГПУ мартенситного превращения в железных сплавах (с учетом матрицы деформации Бейна), которая может быть использована в качестве первичного анализа деформации кристаллической решетки при МП для сплавов системы $(Co_{35}Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20}Ni_5)_{100-x}Si_x$. В настоящей работе методом рентгеноструктурного анализа (РСА) определены параметры кристаллической решетки аустенитной и мартенситной фаз и предпринята попытка оценить величины деформации решетки при МП в сплавах системы $(Co_{35}Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20}Ni_5)_{100-x}Si_x$ (x = 0, 1, 3, 5) с помощью подхода Z. Guo с соавторами [5].

Литые заготовки сплавов $(Co_{35}Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20}Ni_5)_{100-x}Si_x$ (x = 0, 1, 3, 5) были получены в вакуумной индукционной печи в атмосфере аргона. Вырезанные из заготовок образцы сплавов были подвергнуты обработке: отжигу при T = 1200 °C (2 ч), горячей прокатке при 500 °C (80 %) и повторному отжигу при T = 1200 °C (1 ч). После термомеханической обработки сплавы характеризовались крупнозернистой микроструктурой (Таблица 1). Термический гистерезис $\Delta T = A_f - M_s$ для сплава $Co_{35}Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20}Ni_5$ составлял 200 К, для сплавов $(Co_{35}Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20}Ni_5)_{99}Si_1$ и $(Co_{35}Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20}Ni_5)_{97}Si_3$ соответственно ΔT = 150 К и 130 К. За счет уменьшения ЭДУ [3, 4], температуры M_s и M_f сплава $(Co_{35}Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20}Ni_5)_{95}Si_5$ снизились до T < 77 К. Определение параметра решетки аустенитной фазы производилось при T = 297 К по рентгенограммам, полученным для недеформированных образцов. Для определения параметров решетки мартенситной фазы образцы были дополнительно охлаждены до температуры жидкого азота и продеформированы в таких условиях для образования максимально возможной доли мартенсита.

В таблице 1 представлены значения параметров кристаллической решетки высокотемпературной и низкотемпературной фаз, определенные методом РСА, и отношение $c_{ГПУ}/a_{ГПУ}$ для всех сплавов. Легирование сплава $Co_{35}Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20}Ni_5$ кремнием сопровождается уменьшением параметра решетки аустенитной фазы. Подобная закономерность характерна и для сплавов на основе железа [4]. Кремний также уменьшает отношение $c_{ГПУ}/a_{ГПУ}$ для мартенситной фазы. Для сплава $(Co_{35}Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20}Ni_5)_{99}Si_1$ оно

совпадает с идеальным соотношением $(c_{ГПУ}/a_{ГПУ})_{ид}$ = 1,633, обеспечивающим плотнейшую упаковку в ГПУ структуре. Дальнейшее увеличение C_{Si} в сплавах $(Co_{35}Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20}Ni_5)_{100-x}Si_x$ приводит к отклонению от идеального соотношения $c_{ГПУ}/a_{ГПУ} < 1{,}633$.

Таблица 1.Размер зерна d и параметры решетки аустенитной $a_{ГЦК}$ и мартенситной ($a_{ГПУ}$, $c_{ГПУ}$) фаз в сплавах $(Co_{35}Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20}Ni_5)_{100-x}Si_x$

Сплав	d, мкм	$a_{ГЦК}$, Å	$c_{ГПУ}$, Å	$a_{ГПУ}$, Å	$c_{ГПУ}/a_{ГПУ}$
$Co_{35}Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20}Ni_5$	128±65	3,5904±0,0001	4,1401±0,0001	2,5230±0,020	1,641
$(Co_{35}Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20}Ni_5)_{99}Si_1$	90±42	3,5914±0,0027	4,1148±0,0049	2,5201±0,010	1,633
$(Co_{35}Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20}Ni_5)_{97}Si_3$	110±54	3,5903±0,0008	4,1186±0,0025	2,5251±0,012	1,631
$(Co_{35}Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20}Ni_5)_{95}Si_5$	133±64	3,5875±0,0013	4,0891±0,0096	2,5322±0,003	1,615

Согласно феноменологической теории Z. Guo с соавторами [5], дилатация (относительное изменение объема при фазовых переходах) кристаллической решетки определяется через параметры решетки ГЦК- и ГПУ-фаз как:

$$\delta = \left(\frac{\sqrt{2}}{2}a_{\text{ГЦК}} - a_{\text{ГПУ}}\right)/\left(\frac{\sqrt{2}}{2}a_{\text{ГЦК}}\right). \quad (1)$$

Рассчитанные по формуле 3 величины δ для сплавов $(Co_{35}Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20}Ni_5)_{100-x}Si_x$ (x = 0, 1, 3, 5) демонстрируют, что минимальное значение дилатации соответствует сплаву с 5 ат. % Si, то есть легирование кремнием сопровождается снижением относительного изменения объема при МП (Таблица 2). Знание о параметре δ позволяет найти нормальные компоненты матрицы деформации Бейна (в предположении равномерного расширения решетки в плоскости габитуса ГПУ-фазы) η_i (i = 1, 2, 3), которые определяются по формулам [5]:

$$\eta_1 = \eta_2 = 1 - \delta, \quad (2)$$

$$\eta_3 = \frac{d_{0002}}{d_{111}}, \quad (3)$$

где d_{0002} и d_{111} – межплоскостные расстояния плоскостей (0002) ГПУ- и (111) ГЦК-фаз (Таблица 2).

Таблица 2. Величины дилатации кристаллической решетки (δ), рассчитанные по соотношению (1), межплоскостные расстояния d_{0002} и d_{111} соответственно для ГПУ- и ГЦК-фаз и рассчитанные параметры компонент тензора деформации (η), описанного в феноменологической модели ГЦК-ГПУ мартенситных превращений [5]

Сплав	δ	d_{0002}, Å	d_{111}, Å	$\eta_1 = \eta_2$	η_3
$Co_{35}Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20}Ni_5$	0,006	2,070	2,070	0,994	1,000
$(Co_{35}Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20}Ni_5)_{99}Si_1$	0,008	2,069	2,070	0,992	1,000
$(Co_{35}Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20}Ni_5)_{97}Si_3$	0,005	2,065	2,070	0,995	0,998
$(Co_{35}Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20}Ni_5)_{95}Si_5$	0,002	2,067	2,068	0,998	1,000

Стоит отметить, что нормальные компоненты матрицы деформации Бейна η_i (i = 1, 2, 3) сильно отличаются от аналогичных компонент для ГЦК-ОЦК мартенситных превращений в сплавах железа ($\eta_1 = \eta_2 = 1{,}12$, $\eta_3 = 0{,}80$) [6], и что значения η_1 и η_2 приближаются к единице по мере увеличения концентрации кремния в сплавах

$(Co_{35}Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20}Ni_5)_{100-x}Si_x$. Другими словами, легирование кремнием уменьшает величину нормальных компонент η_1 и η_2 матрицы деформации Бейна, которые описывают перестройку кристаллической решетки в плоскостях $(111)_{ГЦК}//(0002)_{ГПУ}$ (при C_{Si} = 5 ат. % они стремятся к 1) при МП. В перпендикулярном направлении – деформация решетки не меняется ($\eta_3 \approx 1$).

Таким образом, методом рентгеноструктурного анализа определены параметры кристаллической решетки аустенитной и мартенситной фаз и оценено изменение деформации решетки при МП в сплавах системы $(Co_{35}Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20}Ni_5)_{100-x}Si_x$ (x = 0, 1, 3, 5). Установлено, что легирование кремнием способствует уменьшению параметра решетки аустенитной фазы и отношения $c_{ГПУ}/a_{ГПУ}$ для мартенситной фазы. В легированных кремнием сплавах величина деформации при переходе из высокотемпературной фазы в низкотемпературную и относительное изменение объема при МП меньше, чем в базовом сплаве $Co_{35}Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20}Ni_5$, что способствует протеканию МП.

Литература

1. И.В. Киреева, Ю.И. Чумляков, А.А. Сараева [и др.]. Термоупругое γ – ε мартенситное превращение и эффект памяти формы в [001] монокристаллах высокоэнтропийного сплава $Cr_{20}Mn_{20}Fe_{20}Co_{35}Ni_5$ при деформации растяжением. Известия вузов. Физика, 2022, 65, 14-24.
2. H.Y. Jeong, J. Lim, J.I. Lee. Effect of grain size on shape memory properties of $Cr_{20}Mn_{20}Fe_{20}Co_{35}Ni_5$ high-entropy alloy. Materials Science and Engineering: A, 2025, 931, 148197.
3. I.V. Kireeva, Y.I. Chumlyakov, Z.V. Pobedennaya [et al.]. Effect of silicon and carbon content on shape memory in a single crystals of Fe–Mn–Cr–Ni–Si-based shape memory alloys. Appl. Phys. Lett., 2026, 128 (17), 171901.
4. N. Stanford, D.P. Dunne. Effect of Si on the reversibility of stress-induced martensite in Fe–Mn–Si shape memory alloys. Acta Materialia, 2010, 58, 6752-6762.
5. Z. Guo, Y. Rong, Sh. Chen, T.Y. Hsu. Crystallography of FCC(γ)→HCP(ε) martensitic transformation in Fe-Mn-Si based alloys. Scripta Materialia, 1999, 41, 153-158.
6. В.М. Гундырев, В.И. Зельдович, В.М. Счастливцев. Кристаллографический анализ и механизм мартенситного превращения в сплавах железа. Физика металлов и металловедение, 2020, 121, 1142-1161.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-19-00197 https://rscf.ru/project/25-19-00197/. Исследования выполнены на оборудовании ЦКП «Нанотех» ИФПМ СО РАН. Авторы выражают благодарность к.ф.-м.н. Астафурову С.В. и к.т.н. Мельникову Е.В. за их помощь в термомеханической обработке материала.

ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ПОВЫШЕНИЯ ПРОЧНОСТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ВЫСОКОЭНТРОПИЙНОГО СПЛАВА КАНТОРА ПУТЕМ ПОВЕРХНОСТНОГО ИОННО-ПЛАЗМЕННОГО НАСЫЩЕНИЯ АТОМАМИ ВНЕДРЕНИЯ

С.В. Астафуров, Е.В. Мельников, Е.А. Загибалова, Л.В. Данилова, А.В. Лучин, М.А. Лысунец

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск
svastafurov@gmail.com

Высокие коррозионная стойкость, ударная вязкость и аномальная пластичность (даже при крайне низких температурах) делают высокоэнтропийный сплав Кантора ($Co_{20}Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20}Ni_{20}$) привлекательным для использования в криогенных технологиях и создания механизмов, эксплуатируемых в химически агрессивных средах. Однако низкие прочностные характеристики данного сплава не позволяют его использовать в качестве конструкционного материала. Поэтому поиск перспективных решений повышения предела текучести и микротвердости сплава Кантора без потери его основных преимуществ является перспективной задачей материаловедения.

В работе проведено исследование механизмов формирования упрочненных атомами внедрения поверхностных слоев и их влияние на прочностные характеристики, пластичность и ударную вязкость высокоэнтропийного сплава Кантора в диапазоне температур от –196 (температура кипения жидкого азота) до +300 ℃. Формирование упрочненных слоев осуществлялось путем поверхностного ионно-плазменного азотирования и нитроцементирования образцов сплава в плазме дугового разряда (температуры обработки – 400 и 500ºС, продолжительность обработки – 1 час).

Методами сканирующей электронной микроскопии и рентгеноструктурного анализа показано, что при выбранных параметрах ионно-плазменной обработки (ИПО) в сплаве формируются модифицированные поверхностные слои толщиной от 15 до 26 мкм, которые состоят из композиционного и диффузионного подслоев. Композиционная зона (расположенная у поверхности) состоит из двух фаз – насыщенного атомами внедрения (азот или азот и углерод в зависимости от вида обработки) аустенита и частиц на основе нитридов и карбидов хрома. Диффузионная область не содержит дисперсных частиц. Она представляет собой насыщенную азотом (и углеродом) ГЦК-фазу.

Формирование таких упрочненных слоев приводит к кратному увеличению поверхностной микротвердости обработанных образцов, она достигает 14 ГПа (азотирование при 500°С) и 13 ГПа (нитроцементирование при 400 °С) по сравнению с микротвердостью необработанного сплава Кантора, составляющей порядка 2 ГПа.

Проведение испытаний на одноосное статическое растяжение в интервале температур от –196 до +300 ℃ показало, что образцы сплава Кантора, подвергнутые ионно-плазменному азотированию и нитроцементированию, демонстрируют более высокие пределы текучести и прочности (до 25% и 5% соответственно) практически без потери пластичности (не более 10%). При этом величина удлинения до разрыва для всех образцов после ИПО во всем рассматриваемом интервале температур превышает 65%. Кроме того, ионно-плазменная обработка по выбранным режимам практически не оказывает влияния на величину ударной вязкости образов сплава Кантора в диапазоне температур от –196 до +23 ℃.

Таким образом, ионно-плазменное азотирование и нитроцементирование позволяет повысить прочностные характеристики высокоэнтропийного сплава Кантора без потери его основных преимуществ – высокой пластичности и ударной вязкости – даже при криогенных температурах.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-19-00199, https://rscf.ru/project/25-19-00199/. Результаты получены с использованием оборудования ЦКП «Нанотех» Института физики прочности и материаловедения СО РАН.

ФИЗИЧЕСКАЯ ПРИРОДА ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ПРЕДЕЛА ТЕКУЧЕСТИ И ЭФФЕКТА ПАМЯТИ ФОРМЫ В НОВЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СПЛАВАХ $(Co_{35}Ni_5Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20})_{100-x}B_x$

Е.Г. Астафурова, Д.О. Астапов, С.В. Астафуров, Е.В. Мельников, Е.А. Загибалова, Л.В. Данилова, А.В. Лучин

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск
elena.g.astafurova@gmail.com

В работе изучено влияние легирования бором на закономерности развития термоупругого ГЦК-ГПУ-ГЦК мартенситного превращения (МП) в многокомпонентном сплаве $Co_{35}Ni_5Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20}$. Сплавы системы $(Co_{35}Ni_5Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20})_{100-x}B_x$ (x = 0,1, 0,2 и 0,5) получены методом индукционной плавки, гомогенизированы, термически и механически обработаны для формирования в образцах разориентированной крупнокристаллической структуры (d > 100 мкм). После обработки все сплавы находились в аустенитной (ГЦК) фазе. Механические свойства изучали методом одноосного растяжения при T = 77-473К. Величины обратимой неупругой деформации (эффекта памяти формы, ЭПФ) определяли по изменению длины рабочей части образцов в тестах на одноосное растяжение при заданной T с последующим нагревом образца выше температуры конца обратного МП (A_f).

Для базового сплава $Co_{35}Ni_5Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20}$ определены характеристические температуры МП (M_s=250К – начало прямого МП при охлаждении, M_f=190К – конец прямого МП, A_s=430К – начало обратного МП при нагреве, A_f=450К), а температурный гистерезис превращения достаточно большой ($\Delta T = A_f - M_s$ = 200К). Температурная зависимость условного предела текучести для базового сплава имеет стадийность, характерную для сплавов с термоупругим МП. При низких температурах испытания ($T < M_s$) зависимость нормальная, и она связана с началом пластического течения в мартенситной ГПУ фазе. При более высоких температурах наблюдается аномальная зависимость предела текучести – он возрастает с ростом температуры и соответствует напряжениям возникновения мартенсита под нагрузкой ($M_s < T < M_d$ = 350К, M_d – температура, при которой напряжения для роста мартенсита под нагрузкой совпадают с пределом текучести высокотемпературной ГЦК фазы). При $T > M_d$ температурная зависимость нормальная и она описывает начало пластической деформации ГЦК фазы. Показано, что при деформировании в интервале температур $T < M_s$ сплав проявляет эффект памяти формы, а величина обратимой деформации достигает 3%. Обратимая неупругая деформация наблюдается вплоть до температуры M_d.

Установлено влияние концентрации бора на характеристические температуры МП и величину температурного гистерезиса в сплаве $Co_{35}Ni_5Cr_{20}Fe_{20}Mn_{20}$. Показано, что добавление 0,1 ат. % бора способствует снижению всех температур МП (M_s=200К) и уменьшению величины температурного гистерезиса превращения, ΔT = 110-120 К. При больших концентрациях бора (0,2 и 0,5 ат.%), температуры МП и ΔT возрастают таким образом, что в сплаве с максимальным его содержанием становятся близки к величинам в базовом сплаве. Показано, что температурная зависимость $\sigma_{0,2}$ в борсодержащих сплавах аналогична зависимости для базовой композиции, но в соответствии с изменениями характеристических температур МП ее стадии смещены в область более низких температур. Твердорастворное упрочнение бором вызывает рост напряжений пластического течения мартенситной и аустенитной фаз, а температурный интервал формирования мартенсита под нагрузкой становится уже: $M_d - M_s$ = 100К в базовом сплаве и 50К в сплаве с 0,5 ат. % бора. Несмотря на указанные закономерности, интервалы проявления ЭПФ в борсодержащих сплавах такие же, как в базовой композиции, а его величина в сплаве с 0,1% В достигает 4% при $T = M_s$.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-19-00197, https://rscf.ru/project/25-19-00197/. Результаты получены с использованием оборудования ЦКП «Нанотех» Института физики прочности и материаловедения СО РАН.

РАЗРАБОТКА И АДАПТАЦИЯ ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ ЖС6К ДЛЯ АДДИТИВНОГО ПРОИЗВОДСТВА

И.И. Астахов[1, 2], М.В. Климова[1], Д.Н. Клименко[1], Г.Г. Задыкян[1], О.Г. Климова-Корсмик[1], Р.С. Корсмик[1], Н.Д. Степанов[1]

[1] Институт Лазерных и Сварочных Технологий, Санкт-Петербургский Государственный Морской Технический Университет, Санкт-Петербург
[2] Белгородский государственный национальный исследовательский университет, Белгород
Astakhov@smtu.ru

Жаропрочные никелевые сплавы (ЖНС) являются ключевыми конструкционными материалами при проектировании современных газотурбинных двигателей (ГТД). Благодаря комплексу высоких физико–механических свойств при повышенных температурах данный класс материалов используется для изготовления наиболее термонагруженных компонентов двигателя [1]. Однако создание деталей сложной геометрии сопровождается исключительной длительностью и ресурсозатратностью технологического цикла, включающего многостадийную механическую и сложную термическую обработку [2]. В настоящее время перспективным решением является использование аддитивного производства (АП). Основной проблемой, препятствующей массовому внедрению послойной печати изделий из ЖНС, является плохая свариваемость большинства никелевых сплавов с высоким содержанием упрочняющей γ′-фазы (Ni3Al), которые подвержены растрескиванию в процессе аддитивного производства.

В данной работе с использованием высокопроизводительного термодинамического моделирования методом CALPHAD на основе серийного сплава ЖС6К разработаны новые составы жаропрочных никелевых сплавов с различной степенью легирования — ХН68 и ХН75 (цифры обозначают содержание никеля, вес.%). Оба сплава успешно получены методом прямого лазерного выращивания. Микроструктурный анализ подтвердил полное отсутствие трещин в модифицированных сплавах в отличие от базового ЖС6К, что свидетельствует об их более высокой технологичности в условиях АП.

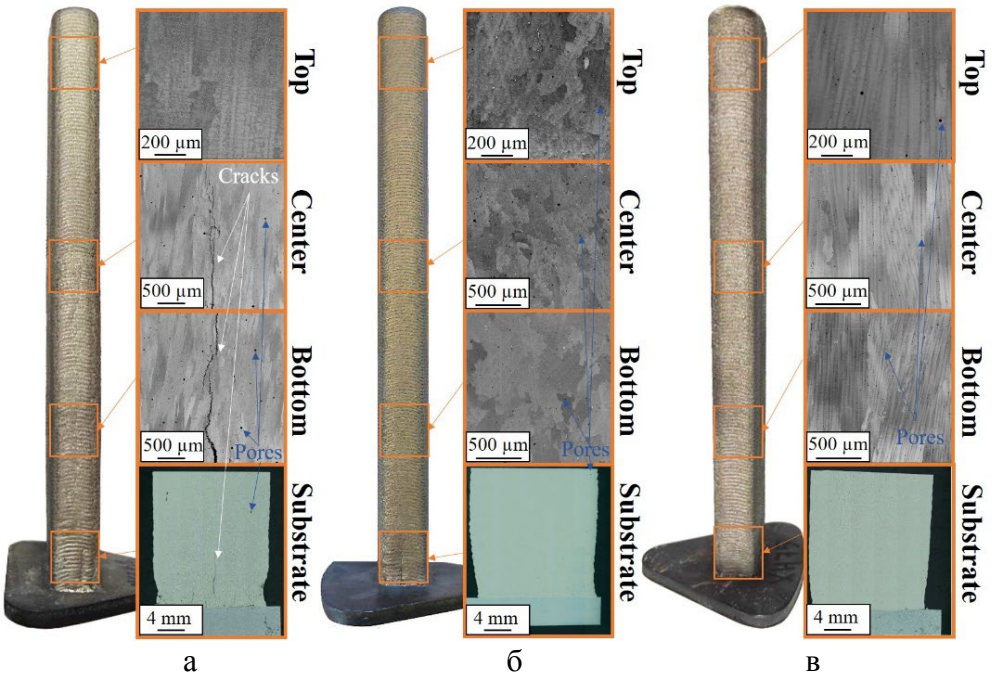
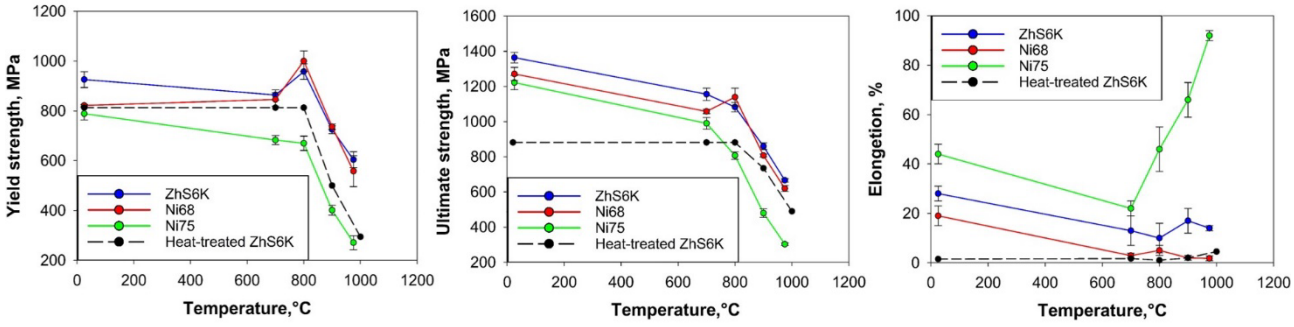


Рис. 1. Общий вид и макроструктура жаропрочных сплавов ЖС6К (а), ХН68 (б) и ХН75 (в).

Механические испытания на растяжение при комнатной температуре показали, что сплав ХН75 демонстрирует превосходную пластичность (относительное удлинение > 40 %) при умеренном снижении прочностных характеристик: предел текучести составил и прочности составил 790 МПа и 1220 МПа соответственно. Сплав ХН68 при комнатной температуре обладает свойствами, сопоставимыми с ЖС6К: предел текучести 900 МПа, предел прочности 1270 МПа при относительном удлинении 19 %. При повышенных температурах (700–900°С) прочностные характеристики сплава ХН68 превышают показатели ЖС6К, а пластичность сохраняется на уровне литого термообработанного исходного сплава.



а б в

Рис. 2. Зависимость предела текучести (а), предела прочности при растяжении (б) и относительного удлинения при разрушении (в) от температуры испытания жаропрочных сплавов ЖС6К, ХН68 и ХН75.

Благодарности

Данное исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-19-00622-П (https://rscf.ru/project/LAJe1GA5lTibJgsK8SUoXdxfwcDcIRdBoAJM2ATmkPQgjh62PJzTUu4tfPP8KxP938N2cpLMaWM~/)

Литература

1. R.C. Reed. The Superalloys: Fundamentals and Applications. Cambridge: Cambridge University Press, 2008. 370 p.
2. Е.Н. Каблов. Литые лопатки газотурбинных двигателей: сплавы, технологии, покрытия. М.: Наука, 2001. 632

ВЛИЯНИЕ ЭКСТРУЗИИ, СОВМЕЩЕННОЙ С РКУП И УЛЬТРАЗВУКОМ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА СПЛАВА СИСТЕМЫ MG-ZN-ZR

Р.Н. Асфандияров[1, 2], Д.А. Аксенов[1], А.Г. Рааб[1,3], М.А. Шишкунова[1, 2], Р.Г. Фаррахов[2], А.Р. Сиразеева[1]

[1]*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, г. Уфа*
[2]*Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа*
[3]*Уфимский государственный нефтяной технический университет, г. Уфа*
a.r.n@list.ru

На сегодняшний день в области медицинского материаловедения наблюдается активное развитие материалов для изготовления временных имплантационных систем. Такие системы изготавливаются из биорезорбируемых материалов, отличающихся постепенным растворением в физиологической среде с образованием нетоксичных продуктов распада, которые в последствии безопасно метаболизируются или выводятся из организма. Применение таких имплантационных систем позволяет исключить операцию по извлечению имплантата после заживления травмы, снижает эффект экранирования напряжений. Стоит отметить, что некоторые биорезорбируемые материалы не просто замещаются, а активно способствуют образованию новой костной ткани, что также является важным преимуществом [1].

Среди биорезорбируемых материалов, подходящих для изготовления ортопедических имплантатов, магниевые сплавы рассматриваются как наиболее перспективные. Тем не менее их широкому использованию препятствуют неоднородные коррозионные процессы, отличающиеся высокой, зачастую неконтролируемой скоростью, недостаточные прочностные характеристики, а также чрезмерно интенсивная водородная деполяризация, негативно влияющая на процессы заживления костной ткани [2].

С целью устранения указанных выше недостатков был разработан совмещенный процесс термомеханической обработки, объединяющий в единой оснастке экструзию, равноканальное угловое прессование и ультразвуковое воздействие (Э-РКУП-УЗ). Технологическим преимуществом предложенного метода является возможность получения длинномерных полуфабрикатов.

В настоящем исследовании обработке методом Э-РКУП-УЗ был подвергнут магниевый сплав Mg-5,8Zn-0,5Zr. В результате экспериментальных работ получены длинномерные лабораторные образцы в виде прутков диаметром 10 мм и длиной 450–500 мм, отличающиеся гладкой поверхностью без дефектов. Было исследовано влияние температурного режима деформации (300 и 400 °С) при скорости деформирования 5,6 мм/с, а также одновременного ультразвукового воздействия (амплитуда 5 мкм, частота 20 кГц) на структуру и свойства полученных лабораторных образцов.

Выявлено, что разработанная схема совмещенной деформационной обработки в исследованных режимах позволяет получать однородную мелкозернистую структуру. Максимальное измельчение зерна достигается при температуре деформации равной 300 °С с одновременным воздействием ультразвука. Также Э-РКУП при 300 °С вызывает более существенное повышение плотности дислокаций по сравнению с температурой обработки равной 400 °С, что, вероятно, связано с различиями в кинетике процессов полигонизации и рекристаллизации, а также приводит к росту микроискажений кристаллической решетки.

Наибольшее упрочнение сплава Mg-5,8Zn-0,5Zr было установлено после Э-РКУП без ультразвукового воздействия, проведенной при температуре 400 °С. В этом случае предел прочности при растяжении достиг значения 340 МПа. В то же время образцы, деформированные с ультразвуком, характеризуются более высокими значениями относительного удлинения. Так наибольшее относительное удлинение равное 23 % зафиксировано у образца, обработанного Э-РКУП с ультразвуком при 300 °С. Наиболее

сбалансированным сочетанием механических свойств обладают образцы, полученные при 400 °С с ультразвуковым воздействием: предел прочности равен 325 МПа, предел текучести составляет 230 МПа, относительное удлинение равно 17 %.

Электрохимические испытания на коррозионную стойкость показали, что образцы после различных режимов Э-РКУП демонстрируют сопоставимые показатели коррозионной стойкости. Образец, полученный методом Э-РКУП без ультразвука при температуре 300 °С, охарактеризовался наименьшим током коррозии равным 0,2154 А, однако у образцов, полученных при наличии ультразвукового воздействия, ток коррозии возрос лишь на 5% до 0,2279 А. В то время как увеличение температуры деформации до 400 °С в отсутствие ультразвукового воздействия привело к возрастанию тока коррозии до 0,3179 А, что составляет ~40 %.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 22-79-10325-П).

Литература

1. J. Xie, T. Zhang, J. Jiang, W. Xue, W. Wang, J. Ni, X. Zhang, X. Liu. Advances in magnesium-based implants for biomedical applications: a comprehensive review and future perspectives. J. Magnes. Alloy., 2025, 13, 2978–3003.
2. Y. Chen, Z. Xu, C. Smith, J. Sankar. Recent advances on the development of magnesium alloys for biodegradable implants. Acta Biomaterialia., 2014, 10, 4561–4573.

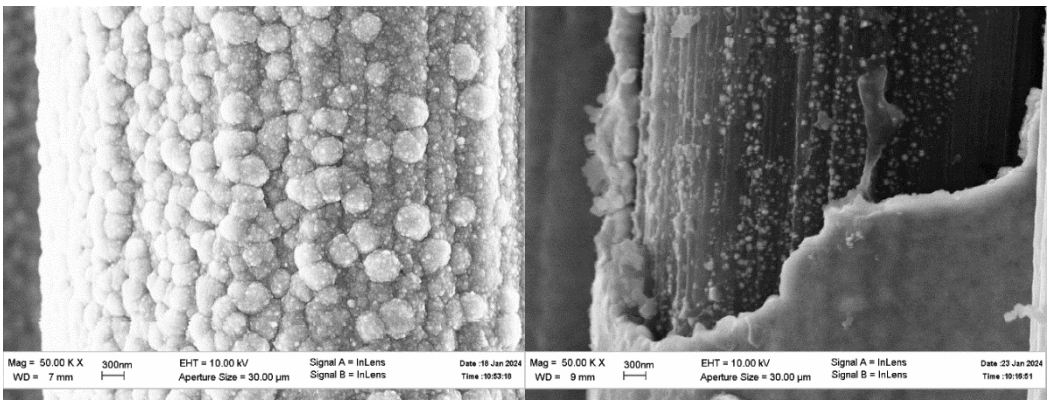
ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО ОСАЖДЕНИЯ НИКЕЛЕВОГО ПОКРЫТИЯ НА УГЛЕРОДНОЕ ВОЛОКНО

Б.И. Атанов

Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка
but305@mail.ru

Разработка материалов, способных длительно выдерживать механические нагрузки при высоких температурах, остаётся одной из центральных задач физического материаловедения. Композит, в котором углеродное волокно армирует никелевую матрицу, позволяет сочетать жаростойкость никеля с сопротивлением ползучести, присущим углеродным волокнам, одновременно повышая удельные прочностные и жёсткостные характеристики и уменьшая вес по сравнению с неармированным никелем. Таким образом, создание углерод-никелевого композита, получаемого прессованием волокна с предварительно нанесённым никелевым покрытием, представляет как фундаментальный, так и практический интерес.

Ключевой стадией, определяющей качество компактированного композита, является нанесение никелевого покрытия на поверхность каждого отдельного волокна. Электрохимическое осаждение из электролита Уоттса, проводимое в режиме непрерывного протягивания углеродного волокна через гальваническую ванну, позволяет формировать металлическое покрытие, избегая при этом термического повреждения волокна, неизбежного при жидкофазных методах. В настоящей работе процесс электроосаждения осуществлялся при непрерывном протягивании углеродного волокна через ванну с электролитом. Управляемыми параметрами процесса являлись концентрация блескообразующих добавок в электролите, катодная плотность тока и время нанесения покрытия, задаваемое скоростью протягивания волокна. В качестве контролируемых характеристик получаемого никелевого покрытия (рис.1) являлись его толщина и степень сплошности.



а б

Рис. 1. Снимки СЭМ углеродного волокна с никелевым покрытием

Работа выполнена в рамках проекта «FFWE-2026-0003» по программе «Создание и функционирование технологических лабораторий по средствам производства и автоматизации, роботизации для проведения прикладных научных исследований в рамках мероприятия «НАУЧНЫМИ ОРГАНИЗАЦИЯМИ И ОРГАНИЗАЦИЯМИ, ОСУЩЕСТВЛЯЮЩИМИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНУЮ ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ ПО ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫМ ПРОГРАММАМ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ И ДОПОЛНИТЕЛЬНЫМ ПРОФЕССИОНАЛЬНЫМ ПРОГРАММАМ, ПРОВЕДЕНЫ НИОКР В ИНТЕРЕСАХ ОРГАНИЗАЦИЙ СФЕРЫ ПРОИЗВОДСТВА СРЕДСТВ ПРОИЗВОДСТВА И АВТОМАТИЗАЦИИ» ФЕДЕРАЛЬНОГО ПРОЕКТА «НАУКА И КАДРЫ ДЛЯ ПРОИЗВОДСТВА СРЕДСТВ ПРОИЗВОДСТВА И АВТОМАТИЗАЦИИ», ВХОДЯЩЕГО В СОСТАВ НАЦИОНАЛЬНОГО ПРОЕКТА ПО ОБЕСПЕЧЕНИЮ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ЛИДЕРСТВА «СРЕДСТВА ПРОИЗВОДСТВА И АВТОМАТИЗАЦИИ»

ДЕФОРМАЦИЯ И РАЗРУШЕНИЕ ГРАФИНОВ ПРИ ОДНООСНОМ РАСТЯЖЕНИИ

А.Х. Ахунова, Ю.А. Баимова

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
akhunova.a.a@gmail.com

Графины представляют собой семейство двумерных углеродных материалов, сочетающих sp- и sp^2-гибридизованные связи. Такие особенности строения определяют их механические свойства при деформации, которые существенно зависят как от направления нагружения, так и от плотности структуры. Графины рассматриваются как перспективные материалы для гибкой наноэлектроники, сенсорики и других приложений, где важны не только электронные, но и механические свойства. При этом поведение графинов при деформации и разрушении остаётся недостаточно изученным, особенно в связи с влиянием направления нагружения и локального коробления структуры.

В настоящей работе методом молекулярно-динамического моделирования исследовано деформационное поведение β_1-, β_3-, γ_1- и γ_2-графинов при одноосном растяжении вдоль направлений кресло и зигзаг с возможностью образования складок [1,2]. Расчёты проводились в пакете LAMMPS с использованием потенциала AIREBO.

Показано, что деформация графинов определяется двумя одновременно действующими механизмами: удлинением и поворотом связей, а также образованием складок. При растяжении вдоль направления кресло у β_1-, γ_1- и γ_2-графинов перед разрушением наблюдается полное разглаживание складок, что сопровождается появлением плато на кривой напряжение–деформация. Для β_3-графина складки сохраняются вплоть до разрушения, и стадия плато отсутствует. При растяжении вдоль направления зигзаг складки не исчезают до момента разрушения для всех исследованных структур.

Установлено, что прочность, модуль Юнга и деформация разрушения зависят от направления нагружения и от особенностей атомного строения графинов. Наиболее заметная анизотропия модуля Юнга наблюдается для γ_2-графина, что связано с различием в плотности распределения атомов вдоль рассматриваемых направлений. Разрушение вдоль направления кресло происходит по различным сценариям для разных графинов и сопровождается формированием локальных дефектов и перестройкой структуры. В случае растяжения вдоль направления зигзаг механизмы разрушения оказываются более схожими, что приводит к близким значениям деформации разрушения.

При нагружении вдоль направления кресло механизмы разрушения различаются для каждого графина. В случае направления зигзаг механизмы разрушения для разных графинов похожи.

Полученные результаты позволяют сделать вывод, что механические свойства графинов определяются не только типом связи, но и топологией структуры, плотностью атомного распределения и возможностью образования складок.

Исследование выполнено при финансовой поддержке государственного задания ИПСМ РАН.

Литература

1 A.Kh. Akhunova, J.A.Baimova. Wrinkling of graphyne under tension: deformation mechanisms and fracture strength. Surfaces and Interfaces, 2026, 80, 108307.
2 A.Kh. Akhunova, L.Kh. Galiakhmetova, J. A. Baimova. New 2D structures: graphynes under tension. Mechanics of Solids, 2024, 59(1), 401-409.

ЗАЩИТНЫЕ ПОКРЫТИЯ НА ОСНОВЕ СКОМКАННОГО ГРАФЕНА: МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

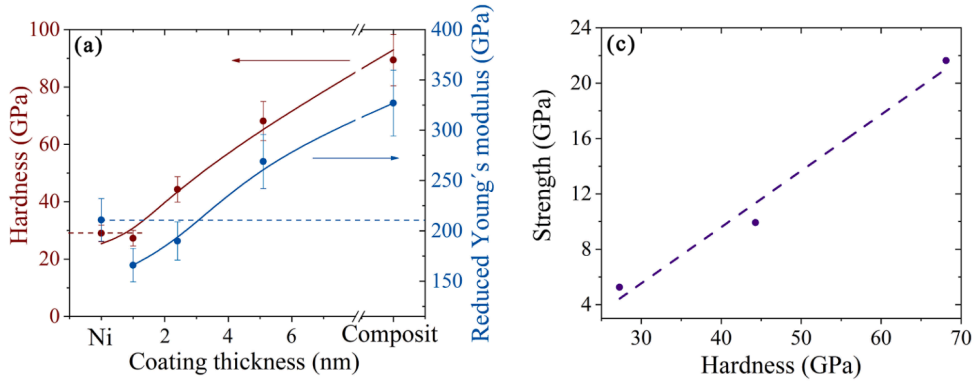
Ю.А. Баимова, К.А. Крылова, Е.А. Рожнова

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
julia.a.baimova@mail.ru

Для повышения прочности и износостойкости поверхности металла в настоящее время активно используются защитные композитные покрытие на основе графена. Одним из методов создания таких покрытий является электроосаждение. Подобные покрытия могут повышать трибологические свойства поверхности металла и коррозионную стойкость, быть самозаживляющимися и даже обеспечивать смазку поверхности.

Методом молекулярной динамики было изучено влияние композитного покрытия на основе скомканного графена и наночастиц металла (никель, медь) на механические свойства поверхности никеля. Работа выполнена для оценки эффективности такого покрытия как защитного слоя, повышающего износостойкость поверхности никеля. Моделирование позволило детально проанализировать деформационные механизмы и рассчитать твёрдость, прочность на растяжение и модуль Юнга никеля с покрытием, а также другие механические характеристики.

Показано, что увеличение толщины композитного покрытия значительно повышает твёрдость металла. Установлено, что при малой толщине покрытия (1 нм) упрочнение связано с дислокационной активностью в никеле, тогда как при большей толщине (2.4 и 5.1 нм) доминирующим механизмом становится перестройка графеновой сетки, в которой происходит перераспределение и поглощение напряжений. При толщине 5.1 нм дислокации в металле практически не образуются, так как нагрузка полностью демпфируется покрытием [1, 2]. Таким образом, варьируя толщину нанопокрытия, можно управлять механическими свойствами, что открывает перспективы для создания высокопрочных защитных покрытий для ответственных деталей в аэрокосмической и автомобильной промышленности.



а б

Рис. 1. (а) Твердость и модуль Юнга в зависимости от толщины покрытия. (б) Связь прочности и твердости покрытия

Литература

1. E.A. Rozhnova, L.R. Safina, K.A. Krylova. Tensile strength and nanohardness of Cu with graphene/Cu composite coating: atomistic simulation. Lett. Mater., 2025, 15(2) 112-119.
2. K.A. Krylova, L.R. Safina, Y. V. Rusalev, J.A. Baimova. The impact of composite nanocoating on nanoindentation of Ni: deformation mechanism. Surf. Interfaces., 2025, 61 106093.

К ВОПРОСУ О КОЛИЧЕСТВЕННОЙ ОЦЕНКЕ КАТИОННОЙ РАЗУПОРЯДОЧЕННОСТИ В ТОНКИХ ПЛЁНКАХ $ZnSnN_2$: СОПОСТАВЛЕНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА И РАСЧЁТОВ PBE–HSE06 ДЛЯ УПОРЯДОЧЕННОЙ И SQS-СТРУКТУР

Б. Балбашио, А.А. Скрылев, Д.В. Шестаков, Л.М. Виноградова, А.В. Нежданов, А.И. Машин

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского ННГУ, Нижний Новгород

bbalbasi@hotmail.com

Нитрид цинка-олова $ZnSnN_2$ рассматривается как перспективный материал для фотовольтаики ввиду прямой запрещённой зоны, высокого коэффициента поглощения и состава из нетоксичных широкодоступных элементов [1, 2]. Однако электронные и оптические свойства $ZnSnN_2$ крайне чувствительны к степени катионной разупорядоченности подрешётки Zn/Sn: теоретические расчёты показывают, что переход от полностью упорядоченной структуры (пространственная группа $Pna2_1$) к разупорядоченной может изменять ширину запрещённой зоны на величину более 1 эВ [3, 4]. При этом надёжный количественный критерий, позволяющий по экспериментальным данным (XRD, КРС, оптическое поглощение) оценить, в какой мере конкретный образец приближается к упорядоченному или разупорядоченному пределу, в литературе разработан недостаточно.

Цель настоящей работы — установить количественную взаимосвязь между структурными характеристиками тонких плёнок $ZnSnN_2$, выращенных на различных подложках, и теоретическими предельными значениями ширины запрещённой зоны, рассчитанными методом HSE06 для (i) идеальной упорядоченной структуры $Pna2_1$ и (ii) модельной структуры с катионным беспорядком (SQS — Special Quasirandom Structure).

В рамках работы методом реактивного со-распыления (RF-магнетронное распыление) получены и охарактеризованы тонкие плёнки $ZnSnN_2$ на подложках SiO_2 (образец S1) и Al_2O_3 (образец S2). Структурные параметры (параметры решётки, размер кристаллитов, микродеформация) определены методом РДА; степень структурного беспорядка оценена по ширине и положению полос комбинационного рассеяния света (КРС); оптическая ширина запрещённой зоны и энергия Урбаха определены методом Таука и анализом экспоненциального края поглощения по данным спектрофотометрии (200–3000 нм).

Электронная структура рассчитывается методом теории функционала плотности в программном пакете Quantum ESPRESSO v7.4 [5]. Планируется выполнить структурную оптимизацию на уровне PBE (GGA) с последующим расчётом ширины запрещённой зоны методом HSE06 [6] для двух предельных моделей: (i) идеальной упорядоченной ячейки $ZnSnN_2$ (16 атомов, $Pna2_1$) и (ii) сверхъячейки 2×2×1 (64 атома) со случайным распределением катионов Zn/Sn, построенной методом SQS для имитации предельного катионного беспорядка.

Ожидается, что значения ширины запрещённой зоны, рассчитанные для двух предельных структур (E_gупоряд. и E_gSQS), позволят определить интервал, в пределах которого должны находиться экспериментально наблюдаемые признаки разупорядоченности. Сопоставление экспериментальных параметров — ширины полос КРС, энергии Урбаха и относительного сдвига оптического края поглощения между образцами S1 и S2 — с данным теоретическим интервалом предоставит количественную оценку степени катионного беспорядка в каждом образце в зависимости от типа подложки и условий роста. Подобный подход развивает методологию, предложенную в работе [3], применительно к сопоставлению нескольких независимых экспериментальных методик с результатами расчётов из первых принципов.

Результаты работы будут способствовать установлению связи между технологическими параметрами осаждения плёнок $ZnSnN_2$ и степенью катионного порядка, что является ключевым фактором для контролируемого получения материалов с заданной шириной запрещённой зоны для применения в тонкоплёночной фотовольтаике.

Таблица 1. Структура планируемого сопоставления

Источник данных	**Метод**	**Определяемая величина**
Образцы S1, S2 (эксперимент)	XRD, КРС, УФ-Вид. спектрофотометрия	D, ε, FWHM, Eg(Tauc), EU
Упорядоченная структура $Pna2_1$	DFT PBE → HSE06	Eg упоряд. (нижний предел беспорядка)
SQS сверхъячейка (2×2×1, 64 атома)	DFT PBE → HSE06	Eg SQS (верхний предел беспорядка)

Литература

1. I.S. Khan, K.N. Heinselman, A. Zakutayev. Review of $ZnSnN_2$ semiconductor material. J. Phys.: Energy, 2020, 2, 032007.
2. P.C. Quayle et al. Synthesis, lattice structure, and band gap of $ZnSnN_2$. MRS Communications, 2013, 3, 135–138.
3. T.D. Veal et al. Band gap dependence on cation disorder in $ZnSnN_2$ solar absorber. Adv. Energy Mater., 2015, 5, 1501462.
4. S. Lany et al. Monte Carlo simulations of disorder in $ZnSnN_2$. Phys. Rev. Materials, 2017, 1, 035401.
5. P. Giannozzi et al. QUANTUM ESPRESSO. J. Phys.: Condens. Matter, 2009, 21, 395502.
6. J. Heyd, G.E. Scuseria, M. Ernzerhof. Hybrid functionals based on a screened Coulomb potential. J. Chem. Phys., 2003, 118, 8207–8215.

ВЛИЯНИЕ ШИРИНЫ ШЕЙКИ НА ЭНЕРГЕТИЧЕСКУЮ ЩЕЛЬ И ОПТИЧЕСКУЮ ПРОВОДИМОСТЬ ПЕРФОРИРОВАННОГО ГРАФЕНА

П.В. Барков, М.М. Слепченков, М.А. Давыдова

Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского, Саратов
barkovssu@mail.ru

Открытие графена и его выдающихся физических характеристик послужило толчком для активного изучения возможностей его практического использования. Ключевым ограничением, сдерживающим внедрение этого материала в области наноэлектроники и оптоэлектроники, выступает нулевая ширина запрещённой зоны. Одним из эффективных способов решения данной проблемы считается создание перфорированного графена (ПГ), представляющего собой регулярный массив наноотверстий [1]. Такая архитектура позволяет целенаправленно изменять электронные свойства материала благодаря проявлению квантово-размерных эффектов. В исследовании [2] было установлено, что формирование наноотверстий инициирует возникновение дополнительных полос поглощения, параметры которых напрямую связаны с диаметром пор и условиями пассивации их краёв. Авторы работы [3] предложили количественные критерии, при которых происходит появление энергетической щели, исходя из соотношения ширины шейки и размеров отверстий. Проведённые экспериментальные измерения подтверждают, что оптические характеристики ПГ демонстрируют выраженную чувствительность к расстоянию между отверстиями [4].

Настоящая работа посвящена исследованию влияния ширины шейки ПГ на электронно-энергетические и оптические свойства. Объектом исследования являются тонкие плёнки ПГ с диаметром отверстия 2 нм с изменяющейся шириной шейки вдоль направлений «зигзаг» (W_X) и «кресло» (W_Y) гексагональной решетки графена. Были получены равновесные по энергии атомные конфигурации супер-ячеек двух групп: 1) супер-ячейки с $W_X = 0.74 \div 2.22$ нм при $\Delta W_X = 0.24$ нм и $W_Y = 0.99$ нм; 2) супер-ячейки с $W_Y = 0.99 \div 2.27$ нм при $\Delta W_Y = 0.42$ нм и $W_X = 0.74$ нм (рис. 1). Всего было построено 7 супер-ячеек первой группы и 3 супер-ячейки второй группы. Для рассматриваемых структур вычисления оптической проводимости выполнялись в спектральном интервале 0.2–2 мкм. Расчёт проводился функционала электронной плотности в приближении сильной связи с самосогласованным вычислением заряда (SCC-DFTB) [5], реализованного в программном пакете открытого доступа DFTB+ [6]. Определение элементов тензора комплексной оптической проводимости производилось через соотношение Кубо–Гринвуда [7].

Для ПГ с диаметром отверстия d = 2 нм проведён анализ влияния параметров W_X и W_Y на энергетическую щель E_g и уровень Ферми E_F. Было показано, что положение E_F мало меняется, как с ростом W_X (-4.75 ÷ -4.78 эВ), так и с ростом W_Y (-4.76 ÷ -4.78 эВ), в то время как E_g между валентной зоной и зоной проводимости демонстрирует высокую чувствительность к размеру W_X. Для ПГ с диаметром отверстия 2 нм величина E_g скачкообразно меняется с ростом W_X и распределены равномерно по значениями W_X: 0.32 эВ при $W_X = 0.74$ нм, 0.27 эВ при $W_X = 1.49$ нм, 0.23 эВ при $W_X = 2.23$ нм. С ростом W_Y энергетическая щель остаётся заметной и слабо уменьшается с 0.30 до 0.26 эВ.

Для выявленных на предыдущем этапе исследования конфигураций ПГ с щелевой зонной структурой (E_g более 0.1 эВ) проводился анализ оптических свойств по рассчитанным спектрам действительной части оптической проводимости (Re σ) в диапазоне длин волн 0.2–2 мкм (УФ-, видимая, ближняя и коротковолновая ИК-области). Расчёты выполнены для двух направлений поляризации света: вдоль осей X (p-тип) и Y (s-тип). Для ПГ с d = 2 нм были рассмотрены случаи с $W_X = 0.74$, 1.24, 1.48, 1.98 и 2.23 нм и с $W_Y = 1.01$, 1.44, 1.87 и 2.3 нм. Для W_X при p-поляризации пики Re σ распределяются по нескольким диапазонам: в УФ-области (0.3 мкм) максимальный пик высотой 2.4 $\pi e^2/2h$ достигается при $W_X = 2.23$ нм, при

переходе из области видимого диапазона в область ближнего ИК (с 0.6 до 1 мкм) высота пиков изменяется от 1.6 до 2.0 $\pi e^2/2h$, в области среднего и дальнего ИК-излучения высота пиков уменьшаются до 1.2 $\pi e^2/2h$ (рис. 2а). Для W_Y при p-поляризации пики Re σ наблюдаются на УФ-диапазоне (0.3 мкм), затем возникают характерные пики 2.7 $\pi e^2/2h$ на 0.5 мкм и 2.4 $\pi e^2/2h$ на 0.6 мкм при W_Y = 1.87 и 2.3 нм соответственно (рис. 3а). В области ближнего и среднего ИК с увеличением W_Y пик смещается по длине волны с 0.8 до 1.2 мкм при постепенном уменьшении высоты пика с 2.1 до 1.6 $\pi e^2/2h$ и с 1.4 до 1.7 мкм с постоянной высотой пика 1 $\pi e^2/2h$. Для W_X при s-поляризации пики проводимости наблюдаются при длинах волн 0.3 мкм, 0.6 мкм и 1.2 мкм. Во всех случаях величины пиков достигают ~2 $\pi e^2/2h$ (рис. 2б). Для W_Y при s-поляризации пики Re σ приходятся сразу на несколько диапазонов длин волн. В УФ-области (0.3 мкм) и в видимом диапазоне (около 0.5 мкм) пики имеют высоту 2 $\pi e^2/2h$, в ближнем ИК-диапазоне высота пиков варьируются в диапазоне 1.4 и 2.1 $\pi e^2/2h$, кроме случая с W_Y = 1.87 нм, для которого пик равен 3.1 $\pi e^2/2h$ (рис. 3б).

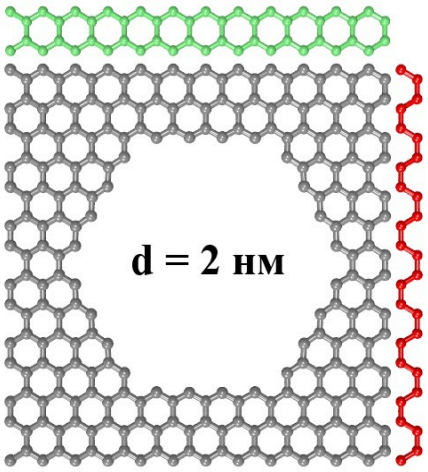
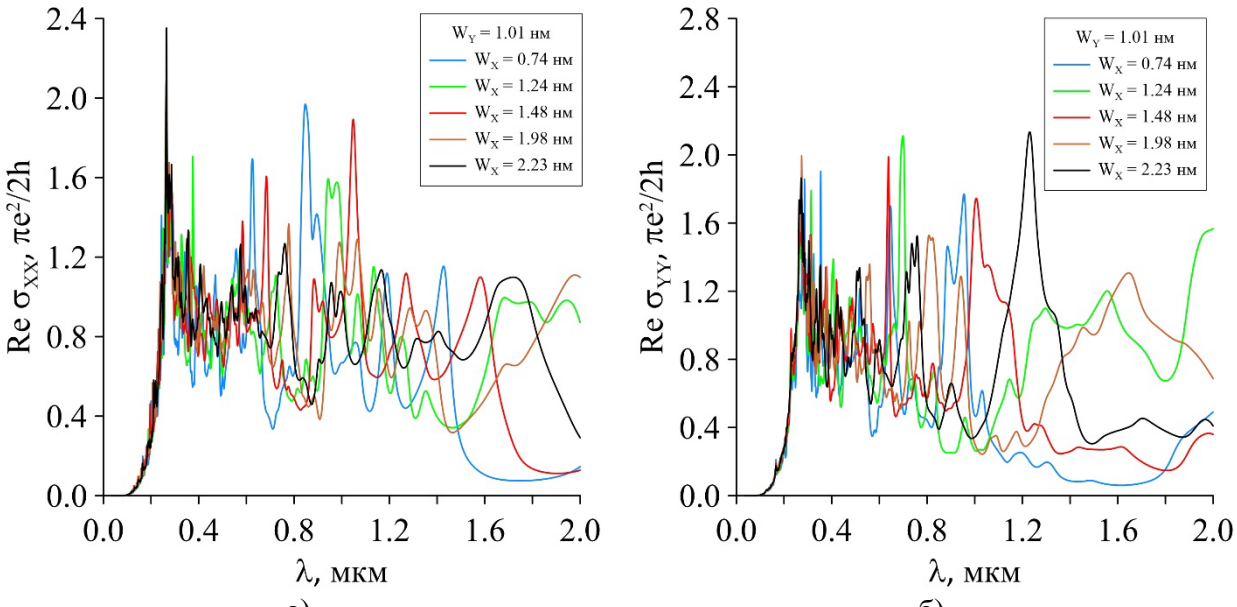
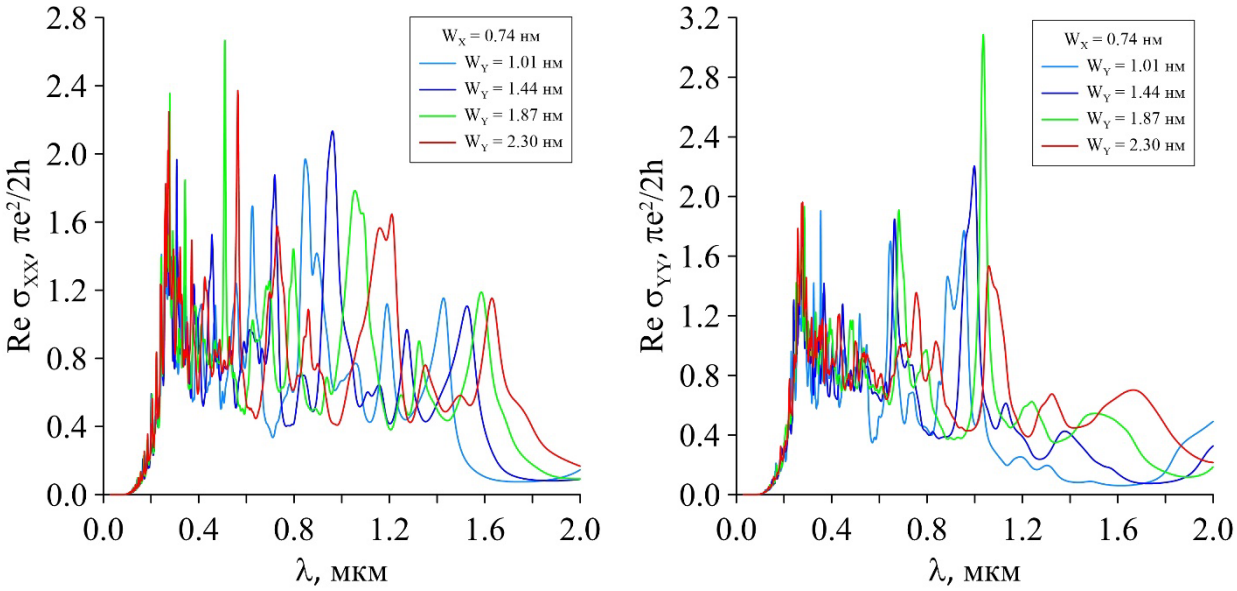


Рис. 1. Исходная супер-ячейка перфорированного графена с минимально-возможным шагом увеличения ширины шейки в направлениях «зигзаг» ΔW_X (красным цветом) и «кресло» ΔW_Y (зеленым цветом).



а) б)

Рис. 2. Действительная часть оптической проводимости пленок перфорированного графена с увеличивающей шириной шейки W_X (от 0.74 нм до 2.22 нм) и постоянной шириной шейки W_Y (1.01 нм) при поляризации света вдоль осей X (а) и Y (б).



а) б)

Рис. 3. Действительная часть оптической проводимости пленок перфорированного графена с увеличивающей шириной шейки W_Y (от 1.01 нм до 2.29 нм) и постоянной шириной шейки W_X (0.74 нм) при поляризации света вдоль осей X (а) и Y (б).

Таким образом, варьирование ширины шеек W_X и W_Y позволяет целенаправленно управлять как электронной структурой (величиной E_g), так и оптическим откликом перфорированного графена, причём наибольшая энергетическая щель достигается при малых W_X, а максимальная оптическая проводимость – при определённых значениях W_Y, особенно при s-поляризации. Полученные результаты подтверждают перспективность использования таких структур для оптоэлектронных приложений, требующих настраиваемых характеристик поглощения и проводимости.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25-72-00202, https://rscf.ru/project/25-72-00202/).

Литература

1. B. Mortazavi, M.E. Madjet, M. Shahrokhi, S. Ahzi, X. Zhuang, T. Rabczuk. Nanoporous graphene: A 2D semiconductor with anisotropic mechanical, optical and thermal conduction properties. Carbon, 2019, 147, 377-384.
2. M.A. Abdelati, M.M. Fadlallah, Y.E.E-D. Gamal, A.A. Maarouf. Pristine and holey graphene quantum dots: Optical properties using time independent and dependent density functional theory. Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, 2021, 128, 114602.
3. H. Chen, K.-H. Jin, H. Guo, B. Wang, A.O. Govorov, X. Niu, Zh. Wang. Nanoperforated graphene with alternating gap switching for optical applications. Carbon, 2018, 126, 480-488.
4. O.V. Sedelnikova, S.G. Stolyarova, A.L. Chuvilin, A.V. Okotrub, L.G. Bulusheva. Holey graphene with enhanced near-infrared absorption: Experimental and DFT study. Appl. Phys. Lett., 2019, 114(9), 091901.
5. M. Elstner, D. Porezag, G. Jungnickel, J. Elsner, M. Haugk, Th. Frauenheim, S. Suhai, G. Seifert. Phys. Rev. B, 1998, 58, 7260.
6. B. Aradi, B. Hourahine, Th. Frauenheim. DFTB+, a sparse matrix-based implementation of the DFTB method. J. Phys. Chem. A, 2007, 111, 5678.
7. M.P. Marder. Condensed Matter Physics. 2th ed., Wiley, New York, 2011. 992 p.

СОРБЦИЯ АТОМОВ ВОДОРОДА СКОМКАННЫМ ГРАФЕНОМ РАЗНОЙ ПЛОТНОСТИ

А.А. Бассареев, К.А. Крылова

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
bassareeev@gmail.com

В настоящее время одной из наиболее актуальных задач водородной энергетики является создание материалов, обеспечивающих безопасное хранение водорода при высокой массовой доле и приемлемых условиях эксплуатации [1]. Для достижения целевого показателя DOE водород-сорбционная емкость материалов должна составлять не менее 5,5 масс.% [2]. Среди перспективных материалов для хранения водорода особое внимание привлекают углеродные наноструктуры благодаря высокой удельной поверхности, малой плотности и пористой структуре. Одним из наиболее перспективных представителей данного класса материалов является скомканный графен, структура которого характеризуется широким диапазоном размеров пор и высокой механической прочностью [3,4].

Несмотря на значительный интерес к данным структурам, водород-сорбционная способность скомканного графена при нормальных условиях остается сравнительно низкой и составляет около 1 масс.% [5]. Известно, что увеличение давления и снижение температуры позволяют существенно повысить сорбционную емкость подобных материалов [6,7]. Вместе с тем одним из наиболее эффективных способов повышения водород-сорбционной способности является изменение морфологии пористой структуры. В частности, степень гидростатического сжатия позволяет регулировать плотность скомканного графена, изменяя размеры пор и доступный для сорбции объем.

В связи с этим в настоящей работе методом молекулярно-динамического моделирования исследованы процессы сорбции атомов водорода скомканным графеном различной плотности и определена структура, обеспечивающая наибольшую водород-сорбционную емкость при температурах 77 и 300 К.

Для получения структур различной плотности использовалась модель ячейки моделирования, содержащей множество чешуек скомканного графена. Изменение плотности осуществлялось путем гидростатического сжатия структуры до степеней деформации: 0,1; 0,2; 0,3; 0,4. Это позволило сформировать четыре структуры с латеральными размерами пор около 18, 14, 12 и 8 Å соответственно.

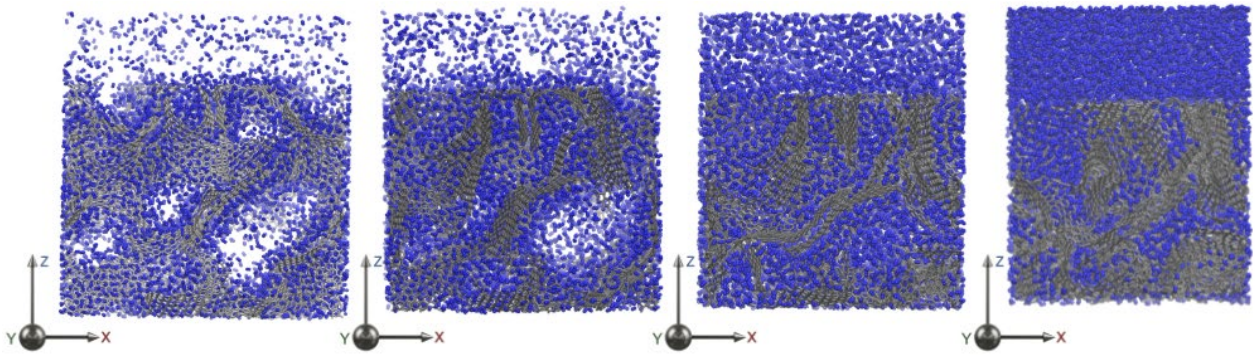
Молекулярно-динамическое моделирование выполнялось с использованием программного пакета LAMMPS [8,9]. Межатомное взаимодействие в системе описывалось потенциалом AIREBO [10]. Анализ водород-сорбционной емкости проводился посредством расчета изменения гравиметрической плотности водорода. Для ее расчета использовалась следующая формула:

$$g = \frac{m_H}{m_H + m_C} \cdot 100\%$$

где m_H – масса адсорбируемых атомов водорода, а m_C – масса атомов углерода.

Для моделирования процесса наводороживания над поверхностью ячейки моделирования размещалась атмосфера водорода, состоящая из 16 500 атомов H. Для обеспечения проникновения водорода в пористую структуру использовалось внешнее давление, направленное вдоль оси Z. Давление задавалось плоским индентером постепенно до достижения глубины 22,5 Å, и фиксировалось в данном положении в течение 600 пс. После этого индентор постепенно возвращался в исходное положение. Это позволило определить как максимальную водород-сорбционную емкость под действием давления, так и количество водорода, сохраняющегося в структуре после его снятия. Моделирование проводилось при температурах 77 и 300 К. На Рис. 1 показана структура скомканного

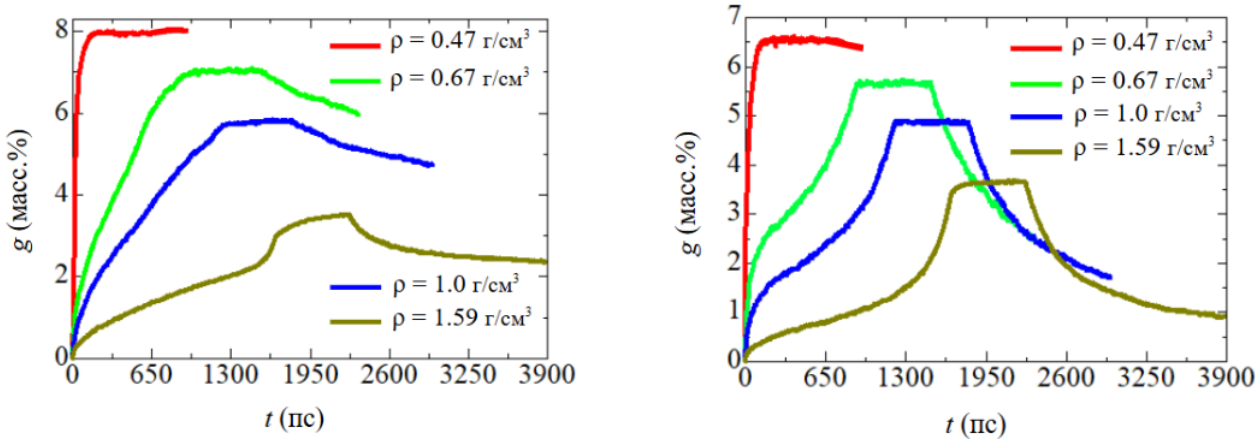
графена различной плотности после процесса наводороживания (атомы водорода и углерода показаны синим и серым цветом соответственно).



а б в г

Рис. 1. Наводороженная структура скомканного графена (а) плотностью ρ=0,44 г/см^3, (б) плотностью ρ=0.67 г/см^3, (в) плотностью ρ=1 г/см^3, г) плотностью ρ=1,59 г/см^3. Атомы углерода и водорода показаны серым и синим цветом соответственно.

На Рис. 2 (а) и (б) показаны кривые зависимости гравиметрической плотности от времени выдержки при 77 и 300 К соответственно скомканного графена разной плотности. Во всех исследованных случаях увеличение плотности структуры приводило к уменьшению латерального размера пор и как следствие к снижению количества сорбированного водорода. Наибольшая гравиметрическая плотность наблюдалась для структуры плотностью ρ=0,44 г/см3, со средним размером пор около 18 Å. При температуре 77 К максимальная величина гравиметрической плотности достигала 8 масс.%, тогда как при 300 К составляла 6,5 масс.%. Для наиболее плотной структуры ρ=1,59 г/см3 средний размер пор составлял около 8 Å, максимальная гравиметрическая плотность уменьшалась до 3,5 масс.% при 77 К и до 3,9 масс.% при 300 К.



а б

Рис. 2. Зависимость гравиметрической плотности скомканного графена разной плотности от времени выдержки при 77 (а) и 300 К (б).

После снятия внешнего давления при температуре 77 К структура с размером пор около 18 Å (структуры плотностью ρ=0,44 г/см^3) практически полностью сохраняла сорбированный водород: гравиметрическая плотность уменьшалась с 8,0 до 7,9 масс.%. Для структур с размерами пор около 14, 12 и 8 Å остаточная гравиметрическая плотность составляла 6,0; 4,7 и 2,4 масс.% соответственно. При температуре 300 К большая остаточная наводороженность также была у структуры с размером пор около 18 Å, которая составила 6,2 масс.% после снятия давления. Для более плотных структур наблюдалось значительно более

интенсивное уменьшение количества сорбированного водорода: остаточная гравиметрическая плотность снижалась до 2,5, 1,7 и 0,9 масс.% соответственно.

Полученные результаты показали, что Водород-сорбционная ёмкость скомканного графена убывает с ростом плотности структур: максимум — 8 масс.% при 77 К у структуры при ρ = 0,47 г/см^3, минимум — 3,5 масс.% у структуры при ρ = 1,59 г/см^3. При 77 К структуры лучше удерживают водород, потери составляют менее 10% после снятия давления; при 300 К структуры плотностью ρ = 0,67–1,59 г/см^3 теряют от 56–75%. Лучшей водород-сорбционной способностью обладает скомканный графен плотностью ρ = 1,59 г/см^3 и с латеральным размером пор ~18 Å. После снятия давления гравиметрическая плотность водорода составляла 8 и 6,2 масс.% при 77 и 300 К соответственно, что превышает целевой показатель DOE (5,5 масс.%).

Полученные результаты могут быть использованы при разработке новых пористых углеродных материалов для хранения водорода, а также при выборе оптимальной плотности скомканного графена, обеспечивающей высокую сорбционную емкость и эффективное удержание водорода в условиях криогенных и комнатных температур

Литература

1. Xie Z., Jin Q., Su G., Lu W. A review of hydrogen storage and transportation: progresses and challenges. Energies, 2024, 17(16) 4070.
2. Laalam A., Bazazi P. Holding the invisible: Advanced materials for hydrogen storage. International Journal of Hydrogen Energy, 2025, 169 151057.
3. Cranford S.W., Buehler M.J. Packing efficiency and accessible surface area of crumpled graphene. Physical Review B, 2011, 84(20) 205451.
4. Leão M.B., Bordin J.R., de Matos C.F. Specific surface area versus adsorptive capacity: an application view of 3D graphene-based materials for the removal of emerging water pollutants. Water, Air, & Soil Pollution, 2023, 234 136.
5. Ghosh A., et al. Hydrogen storage in chemically modified graphene. J. Phys. Chem. C, 2008, 112(40) 15704–15707.
6. Jain V., Kandasubramanian B. Functionalized graphene materials for hydrogen storage. Journal of Materials Science, 2020, 55(6) 1865–1903.
7. Tozzini V., Pellegrini V. Prospects for hydrogen storage in graphene. Physical Chemistry Chemical Physics, 2013, 15(1) 80–89.
8. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. Journal of Computational Physics, 1995, 117(1) 1–19.
9. Thompson A.P., et al. LAMMPS — a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales. Computer Physics Communications, 2022, 271 108171.
10. Stuart S.J., Tutein A.B., Harrison J.A. A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions. J. Chem. Phys., 2000, 112(14) 6472–6486.

ОПИСАНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ ЗЕРЕННОЙ СТРУКТУРЫ АЛЮМИНИЕВЫХ СПЛАВОВ СЕРИИ 5XXX ПРИ ГОРЯЧЕМ ДЕФОРМИРОВАНИИ

Д.С. Безверхий, Н.С. Кондратьев, М.Н. Балдин, А.А. Гошкодер, Э.Р. Шарифуллина

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь
dsbezverkhijj@pstu.ru

Алюминиевые сплавы серии 5XXX широко применяются в авиационной, автомобильной, судостроительной и аэрокосмической отраслях благодаря своим эксплуатационным характеристикам: низкой плотности, высокой коррозионной стойкости и трещиностойкости, хорошей свариваемости и формуемости [1]. Создание заготовок и изделий из этих сплавов опирается на процессы обработки металлов давлением – прокатку, штамповку, осадку, ковку, волочение, – которые зачастую реализуются при повышенных и высоких температурах. Формирование необходимого комплекса прочностных свойств при такой обработке неотделимо от состояния микроструктуры материала, а ключевыми механизмами ее перестроения являются деформационное упрочнение, динамический возврат и рекристаллизация [2].

При горячем деформировании в технологическом диапазоне температур и скоростей деформирования зеренная структура алюминиевых сплавов перестраивается в результате процессов рекристаллизации и возврата [3]. Образование новых зерен и последующая миграция межзеренных границ приводят к формированию преимущественно равноосной структуры. Интенсивность рекристаллизации определяется температурой обработки, величиной накопленной деформации, скоростью деформирования и фазово-компонентным составом материала.

Особую роль в эволюции микроструктуры материалов играют частицы вторичных фаз. Крупные интерметаллидные частицы образуют области с повышенной плотностью дефектов и способствуют зарождению новых зерен по механизму PSN (particle stimulated nucleation) [4]. Мелкие дисперсоидные частицы, напротив, оказывают тормозящее действие на миграцию границ за счет пиннинг-эффекта, причем при пониженных температурах и скоростях деформации это может приводить к подавлению рекристаллизации [3]. Вместе с тем, в сплавах с пониженной энергией дефекта упаковки реализуется классический механизм образования зародышей на исходных большеугловых границах зерен за счет их локального выгибания – механизм SIBM (strain induced boundary migration) [3]. Совместный учет этих конкурирующих механизмов необходим для адекватного описания кинетики процесса и формируемой зеренной структуры.

Для прогнозирования микроструктуры и свойств изделий актуальным является применение физически обоснованных многоуровневых конститутивных моделей [5], позволяющих отслеживать состояние и эволюцию внутренней структуры материала. С позиции баланса вычислительной эффективности и предсказательной способности оптимальными являются статистические многоуровневые модели, описывающие поведение представительного объема поликристалла совокупностью отдельных зерен. В настоящей работе развивается статистическая многоуровневая модель динамической рекристаллизации, ориентированная на описание поведения алюминиевых сплавов при горячей обработке давлением [6]. Модель включает несколько масштабных уровней: уровень представительного объема поликристалла, мезоуровень отдельного зерна и вспомогательный мезоуровень субзеренной структуры.

Работоспособность развиваемого подхода подтверждается в задачах горячего деформирования поликристаллических образцов алюминиевых сплавов серии 5XXX [7]. Идентификация параметров модели осуществляется на совокупности экспериментальных характеристик – диаграммы напряженно-деформированного состояния, конечному среднему размеру зерен и объемной доле рекристаллизованного материала. Дополнительно к этому,

результаты моделирования согласуются с экспериментальными данными по распределению размеров зерен, доле новых зерен с разделением вкладов механизмов зарождения и эволюции кристаллографических текстур.

В рамках модели влияние частиц вторичных фаз учитывается в обоих процессах – зародышеобразовании и миграции границ. Скорость образования зародышей на границах зерен описывается с использованием макрофеноменологических соотношений, адаптированных к многоуровневой постановке. Также предложен оригинальный способ описания формы зерен, основанный на ее эллипсоидальном представлении и сопряженной аппроксимации конечным набором плоских фасеток. Для описания движения фасетки используется аффинное преобразование в скоростной постановке. Результаты воспроизводят возвращение зерен к равноосной форме в процессе отжига.

Универсальность многоуровневого подхода позволяет распространить предложенную модель на широкий класс алюминиевых сплавов и использовать ее для определения рациональных температурно-скоростных режимов обработки металлов давлением и прогнозирования прочностных свойств конечных изделий.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-19-00747, https://rscf.ru/project/25-19-00747/.

Литература

1. G. Maizza, R. Pero, M. Richetta, R. Montanari. Continuous dynamic recrystallization (CDRX) model for aluminum alloys. Journal of Materials Science, 2018, 53(6) 4563-4573.
2. T. Sakai, A. Belyakov, R. Kaibyshev, H. Miura, J.J. Jonas. Dynamic and post-dynamic recrystallization under hot, cold and severe plastic deformation conditions. Progress in Materials Science, 2014, 60 130-207.
3. F.J. Humphreys, M. Hatherly. Recrystallization and Related Annealing Phenomena. Elsevier, 2012.
4. H.E. Vatne, M.A. Wells. Modelling of the recrystallization behaviour of AA5xxx aluminium alloys after hot deformation. Canadian Metallurgical Quarterly, 2003, 42(1) 79-88.
5. P.V. Trusov, A.I. Shveykin, N.S. Kondratyev, A.Y. Yants. Multilevel models in physical mesomechanics of metals and alloys: results and prospects. Physical Mesomechanics, 2021, 24(4) 391-417.
6. Д.С. Безверхий, Н.С. Кондратьев, Э.Р. Шарифуллина. Многоуровневая модель для описания динамической рекристаллизации алюминиево-магниевого сплава. Физика металлов и металловедение, 2026, 127(2) 226-235.
7. Mikó T. Necklace formation during dynamic recrystallization of 5182 aluminium alloy under isothermal compression. Materials Science Forum, 2015, 812 167-172.

ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НЕРЖАВЕЮЩЕЙ СТАЛИ ПРИ ГОРЯЧЕЙ АСИММЕТРИЧНОЙ ПРОКАТКЕ

М.А. Бирюков, А.М. Песин, О.Д. Бирюкова, Д.О. Пустовойтов

МГТУ им. Г.И. Носова, Магнитогорск
bigmax174@gmail.com

Асимметричная прокатка на сегодняшний день является одним из способов улучшения механических свойств, по своему механизму близким к способам интенсивной пластической деформации [1]. Известно много работ, основанных на исследовании холодной асимметричной прокатки как черных, так и цветных металлов и сплавов [2 – 4]. Однако процесс горячей асимметричной прокатки изучен недостаточно широко. В данной работе оценивается возможность обеспечения высоких прочностных характеристик нержавеющей стали марки 20Х13 за счет формирования мелкозернистой микроструктуры путем деформирования материала в области температур, обеспечивающих протекание динамической рекристаллизации. Исследуемая марка нержавеющей стали широко применяется в различных отраслях, например, медицинской, пищевой, строительной, автомобильной и т.п.

Стандартный способ обработки этой стали включает в себя горячую прокатку и последующую термическую обработку в виде нормализации, закалки или отпуска. При асимметричной прокатке возможно получить уровень временного сопротивления, значительно превышающий значения, получаемые после закалки. Для подтверждения были проведены эксперименты на уникальной научной установке лабораторно-промышленном стане 400 асимметричной прокатки, представленный на рисунке 1. Данное оборудование входит в реестр уникальных установок России благодаря возможности изменять отношение скоростей рабочих валков относительно друг друга в диапазоне 1…10.



Рис. 1. Уникальная научная установка, лабораторно-промышленный стан 400 асимметричной прокатки лаборатории «Механика градиентных наноматериалов им. А.П. Жиляева» ФГБОУ ВО «МГТУ им. Г.И. Носова»

План эксперимента включал в себя два основных блока:

1 Асимметричная прокатка стали 20Х13 без использования завершающей термической обработки;

2 Асимметричная прокатка с использованием последующего отпуска.

Для сравнения результатов часть образцов была прокатана в симметричном режиме. Скорости верхнего и нижнего рабочих валков в этом случае были установлены на уровне 8 об/мин. В асимметричном режиме скорость верхнего валка снижали постепенно до 4 об/мин. Отношение скоростей валков соответственно составило $V_1/V_2 = 1…2$. Температура нагрева перед прокаткой варьировалась от 900 °С до 1000 °С.

Результаты показали увеличение относительного обжатия при увеличении отношения скоростей валков в пределах 10 % и одновременное снижение усилия до 25 %. Наибольшее значение временного сопротивления по режимам без использования термической обработки составило 2100 МПа. Дополнительный отпуск снизил данную прочностную характеристику до 640 МПа (более, чем в 3 раза).

Благодарность: Исследования выполнены за счет гранта РНФ (соглашение № 24-19-20026, https://rscf.ru/project/24-19-20026/)

Литература

1. А.М. Песин, Д.О. Пустовойтов, М.К. Свердлик. Развитие теории и технологии процесса асимметричной тонколистовой прокатки как метода интенсивной пластической деформации. Магнитогорск: Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова, 2017. 150 с.
2. А.Е. Могильных, О.Д. Бирюкова, А.М. Песин, Д.О. Пустовойтов. Исследование возможности регулирования твёрдости алюминиевых сплавов при асимметричной прокатке. Теория и технология металлургического производства, 2023, 4(47) 21-25.
3. М.Б. Черняховский. Моделирование и совершенствование процесса асимметричной холодной прокатки стальной ленты. Магнитогорск, 2002. 132 с.
4. Г.П. Корнилов, В.В. Шохин, А.А. Бочкарев, Д.М. Шарафутдинов. Экспериментальное исследование асимметричной прокатки на 5-клетьевом стане 630 ПАО "ММК". Актуальные проблемы современной науки, техники и образования: Тезисы докладов 81-й международной научно-технической конференции. Магнитогорск: Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова, 2023. 269.

ТРИБОЛОГИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПЛЕТЕНЫХ САЛЬНИКОВЫХ УПЛОТНЕНИЙ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ С ШЕРОХОВАТЫМ ТЕЛОМ

П.О. Буковский[1], О.О. Щербакова[1], Т.И. Муравьева[1], Д.В. Демченко[2]

[1]Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва
[2]Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия
bukovskiyPO@ipmnet.ru

Терморасширенный графит (ТРГ), получаемый из природного сырья, является приоритетным материалом при разработке уплотнительных материалов, способных работать в экстремальных режимах. Надежность и увеличенный ресурс графитовых уплотнений обусловлены комплексом уникальных физико-механических свойств ТРГ. Он обладает высокой термостойкостью, достаточной гибкостью и пластичностью и пр. Вместе с тем, применение уплотнений на основе ТРГ в узлах трения имеет некоторые недостатки, связанные с относительно низкой механической прочностью графита. Для придания дополнительной жесткости возможно комбинирование графита с металлическими элементами (армирование). Это позволяет создавать гибридные материалы, которые сочетают механическую прочность металла с химической стойкостью и пластичностью графита.

Трибологические характеристики для уплотнительных материалов имеют важнейшее значение, от них зависит ресурс контактной пары и необходимое усилие герметизации. Важно отметить, что ТРГ, в отличие от большинства трибосистем, где снижение шероховатости контртела ведёт к уменьшению трения, демонстрирует обратный эффект: рост шероховатости сопряжённой поверхности способен снижать коэффициент трения. Это объясняется спецификой микроструктуры ТРГ и процессами формирования на поверхности прочной трибопленки. Известно [1], что начальная шероховатость стального контртела напрямую влияет на ее морфологию и адгезионную прочность.

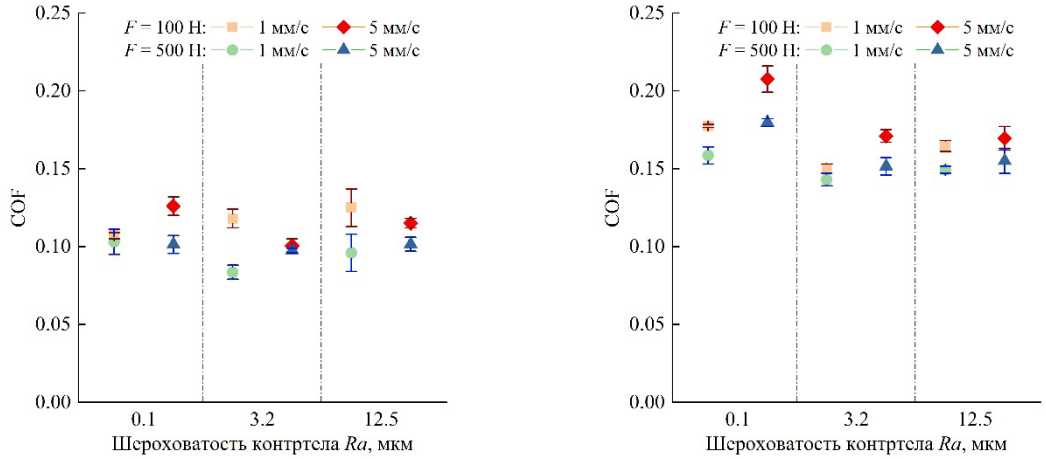
Целью настоящей работы являлось изучение влияния микрогеометрии контртела на трибологические характеристики плетеных сальниковых уплотнений, изготовленных из терморасширенного графита.

Объектами исследования являлись две серии образцов сальниковых набивок на основе ТРГ. Образцы Н1200 представляли собой уплотнение на основе чистого терморасширенного графита. Образцы НО1300 являлись гибридным уплотнением, в котором графитовая матрица была усилена вплетенной металлической проволокой. В качестве контртел использовали пластины из стали ШХ15 с заданным микрорельефом, выраженным шероховатостью 0,1; 3,2 и 12,5 мкм, что соответствовало типичным значениям для уплотняемых поверхностей запорной арматуры.

Трибологические испытания проводили на трибометре UMT-3MT (Cetr, США) по схеме полного контакта с целью определения коэффициента трения. Эксперименты проводили при постоянной нагрузке F = 500 Н в условиях линейного возвратно-поступательного перемещения образца относительно стального контртела. Для имитации реальных условий работы сальникового узла скорость скольжения составляла V = 1 и 5 мм/с соответственно.

Электронномикроскопические исследования проводили на приборе QUANTA 650 (Thermo Fisher Scientific, США).

На рис. 1 приведены зависимости коэффициента трения образцов Н1200 и НО1300 от шероховатости стального контртела при различных нагрузках и скоростях скольжения.

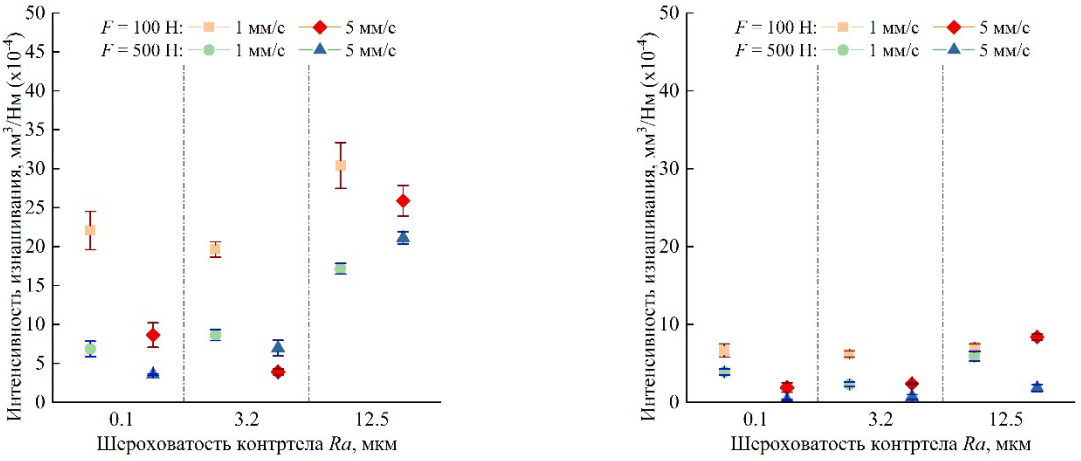


а б

Рис. 1. Диаграммы зависимости коэффициента трения (а) образца Н1200 и (б) образца НО1300 от шероховатости контртела

Из рисунка видно, что для обоих типов образцов наблюдается немонотонный характер зависимостей с минимумом значения коэффициента трения при *Ra* = 3,2 мкм. При такой шероховатости контртела в контактной зоне формируются оптимальные условия для механического закрепления частиц графита в микронеровностях стали и формируется стабильная трибопленка. Рисунок также демонстрирует, что армирование металлом образца НО1300 приводит к повышению коэффициента трения по сравнению с неармированным. Это обусловлено наличием металлического каркаса, увеличивающего сопротивление сдвигу в контактной зоне. Характер зависимости от шероховатости при этом сохраняется — минимальные значения коэффициента трения для армированного образца также достигаются при *Ra* = 3,2 мкм.

На рис. 2 показаны зависимости интенсивности изнашивания образцов Н1200 и НО1300 от шероховатости контртела.



а б

Рис. 2. Диаграммы зависимости интенсивности изнашивания (а) образца Н1200 и (б) образца НО1300 от шероховатости контртела

Рисунок демонстрирует, что минимальные значения интенсивности изнашивания также наблюдаются при контакте с контртелом шероховатостью *Ra* = 3,2 мкм. Причем, для НО1300 она значительно ниже, чем для Н1200.

СЭМ-изображения поверхности образцов после трибологических испытаний при нагрузке 500 Н и скорости скольжения 5 мм/с. показана на рис.3.

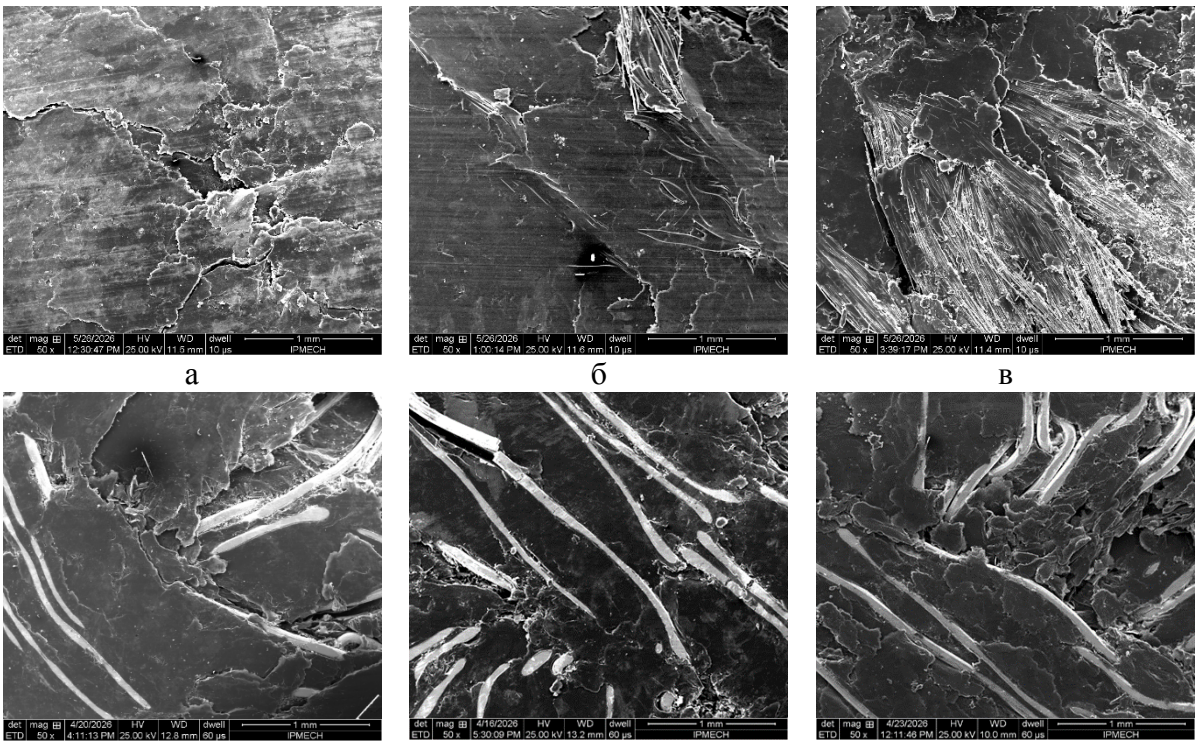


Рис. 3. СЭМ-изображения поверхностей образцов Н1200 (а-в) и НО1300 (г-е) после испытаний при F = 500 Н и V = 5 мм/с и шероховатости контртела 0,1 мкм (а, г), 3,2 мкм (б, д), 12,5 мкм (в, е)

Электронномикроскопические исследования показали, что морфология изношенных поверхностей обоих исследуемых материалов находится в зависимости от шероховатости контртела. В паре трения с гладким контртелом (Ra = 0,1 мкм) доминирует адгезионное взаимодействие, что приводит к неравномерному съему материала, отслаиванию и очаговому выкрашиванию. Оптимальные условия создаются при контакте с контртелом Ra = 3,2 мкм, здесь формируется стабильная защитная трибопленка, которая выстраивается в упорядоченные структуры по вектору скольжения и обеспечивает наиболее сглаженный микрорельеф. Увеличение параметра шероховатости контртела до Ra = 12,5 мкм провоцирует пластическую деформацию и локальные разрушения. Важно отметить, что, несмотря на идентичную природу возникающих дефектов у обеих исследуемых образцов, армированный материал НО1300 подвержен им в существенно меньшей степени, что демонстрирует его наилучшую сопротивляемость износу.

Заключение: Проведенные исследования показали, что армирование ТРГ металлической проволокой значительно повышает износостойкость за счёт упрочнения графитовой матрицы, препятствуя распространению трещин и стабилизации защитного слоя в зоне трения. Установлено, что при контакте с контртелом Ra = 3,2 мкм формируется упорядоченный, ориентированный вдоль направления скольжения микрорельеф, который способствует формированию стабильной трибопленки, обеспечивающей оптимальные триботехнические характеристики.

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ 25-11-00350.

Литература

1. A. Rewolińska, K. Perz, G. Kinal. Effect of Steel Surface Roughness and Expanded Graphite Condition on Sliding Layer Formation. Materials, 2021, 14, 2960.

ОСОБЕННОСТИ КОРРОЗИОННЫХ ПРОЯВЛЕНИЙ НА ПОВЕРХНОСТИ ТРУБНЫХ СТАЛЕЙ ВО ВЛАЖНЫХ ГАЗОВЫХ СЕРОВОДОРОДНЫХ И УГЛЕКИСЛОТНЫХ СРЕДАХ

Р.К. Вагапов, Р.Р. Кантюков, Д.Н. Запевалов

ООО «Газпром ВНИИГАЗ», Санкт-Петербург
R_Vagapov@vniigaz.gazprom.ru

Эксплуатация промысловых и технологических объектов добычи и транспортировки углеводородов может осложняться присутствием коррозионно-активных компонентов (сероводорода и/или диоксида углерода) [1, 2]. Присутствие влаги, сопутствующей добываемому углеводородному сырью, совместно с вышеуказанными агрессивными газами приводит к угрозам повреждения и разрушения стальных оборудования и трубопроводов из-за процессов внутренней коррозии, в том числе наиболее опасных локальных дефектов на стали [3].

В нашем исследовании мы сосредоточились на процессах сероводородной и углекислотной коррозии, возникающих и характерных именно для газовой среды. Наиболее типичными и агрессивными при этом по отношению к углеродистым и низколегированным сталям, из которых изготовлено большинство объектов, являются процессы испарения влаги в газовой фазе с последующей их конденсацией на внутренней поверхности газопроводов (условия top of the line), и условия переменного смачивания, когда воздействие водной среды со стенкой трубы или оборудования будет носить непостоянный характер (с попеременным контактом с водной и с газовой фазами). Применяемые нами для оценки стойкости трубных сталей методы испытаний направлены на максимально возможное воспроизведение опасных факторов и агрессивных условий реального газового объекта исследования и формирование («выращивание») локальных коррозионных дефектов и продуктов коррозии. Как видно (рис. 1), именно в местах образования и отслоения продуктов коррозии могут наиболее интенсивно развиваться коррозионные дефекты.

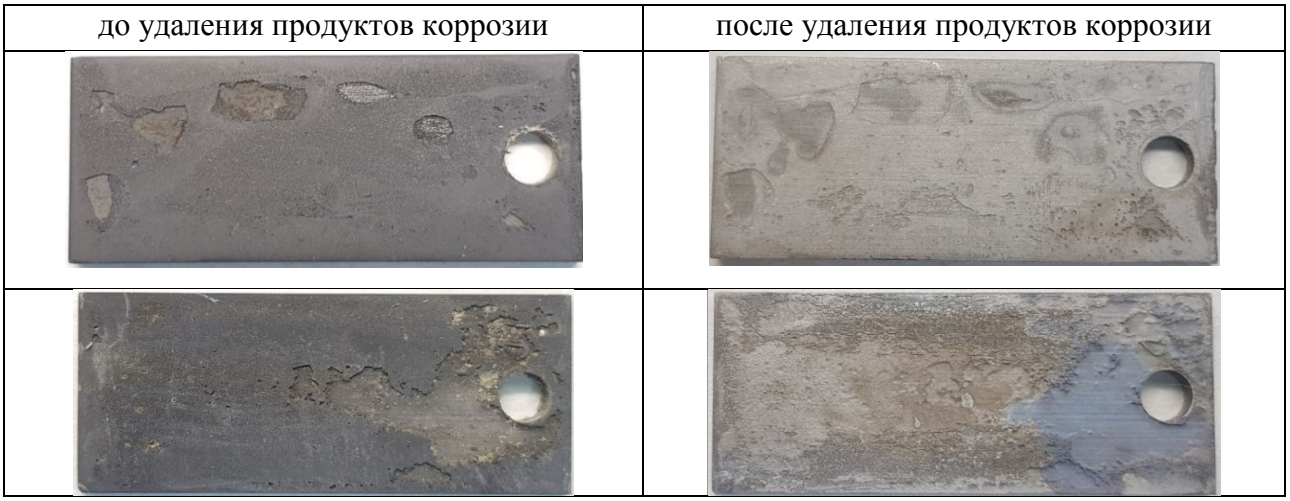


Рис. 1. Внешний вид стальных образцов после испытаний в углекислотных средах в условиях переменного смачивания

Для оценки агрессивности газовых сред обычно используются имитационные испытания с определением скорости внутренней коррозии гравиметрическим методом. В дополнение к ним и по результатам таких испытаний нами введен в практику анализ состава образующихся продуктов коррозии (сульфидов и карбонатов железа). В таких исследованиях генезиса возникновения и механизмов протекания коррозионных процессов играет важную

роль изучение морфологии образующихся на стальной поверхности отложений [4, 5]. По данным анализа их состава можно оценивать степень их защитных свойств и опасность развития общей и/или локальной коррозии при отслаивании и нарушении сплошности пленки продуктов коррозии.

В отличие от исследований других авторов, нами также были применены компьютерный анализ и обработка состава и морфологии осадков (продуктов внутренней коррозии), образующихся во влажной газовой среде с присутствием сероводорода и/или диоксида углерода по результатам вышеописанного имитационного моделирования.

В углекислотных газовых средах в качестве продукта коррозии образуется стехиометрический $FeCO_3$, который имеет гексагональную кристаллическую структуру со следующими эталонными параметрами элементарной ячейки (***э.я.***): a = 4,6920 Å, c = 15,3800 Å. Вместе с $FeCO_3$ может образовываться и нестехиометрический $M_xFe_yCO_3$ (M = (Ca^{2+}, Mg^{2+} или Mn^{2+}), а индексы a + b = 1), структурные параметры кристалла которого и, соответственно, параметры ***э.я.*** будут отличаться. По результатам компьютерной обработки данных рентгеновского анализа была выполнена оценка степени замещения Fe^{2+} на другие катионы в кристаллической решетке стехиометрического $FeCO_3$. Дополнительно таким же способом была выполнена оценка еще одного параметра: профиля рефлекса сидерита по величине полной ширины рефлекса на половине абсолютной высоты (***β***), часто называемой полушириной (эталонное значение для стехиометрического сидерита составляет 0,080°). Основными факторами, обуславливающими изменения ***β*** и параметров ***э.я.*** являются структурные особенности минералов (размер кристаллитов, микроискажения и дефекты кристаллической решетки).

При анализе и компьютерной обработке данных по составу продуктов сероводородной коррозии в дополнении к вышеуказанным параметрам нами были рассчитаны по формуле Шерер–Селякова размеры кристаллитов (область когерентного рассеяния) FeS (макинавита). Коррозионные проявления в сероводородных газовых средах имеют особенности, помимо общих потерь и локальных дефектов, возникают также проявления в виде блистерингов (пузырей) и водородного растрескивания на поверхности стали (рис. 2).

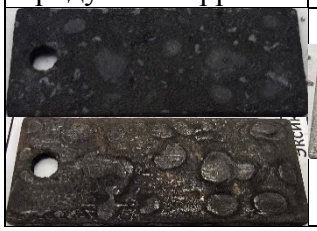
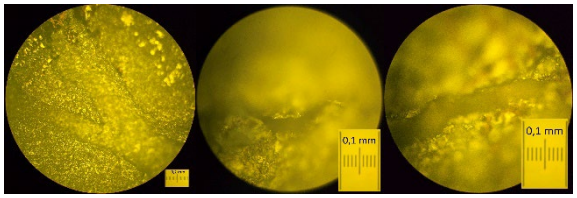
Внешний вид стальных образцов		Наиболее типичные коррозионные повреждения на поверхности стали под микроскопом (в масштабе)
до удаления продуктов коррозии	после удаления продуктов коррозии	
		

Рис. 2. Внешний вид стальных образцов после испытаний в сероводородных средах в условиях top of the line.

Как показали наши исследования методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ), осадки, полученные в сероводородных средах, отличаются по микроструктуре, в зависимости от условий (фазы), и носят несплошной характер, не препятствующий проникновению коррозионных компонентов к поверхности стали (рис. 3).

В результате компьютерной обработки данных рентгеновской дифракции нами было установлено, что определенные вышеописанные показатели кристаллической решетки образующихся карбонатов или сульфидов железа, являясь качественной и суммарной характеристикой всех их структурных неоднородностей, могут служить для оценки исходных условий среды образования (газовая или водная фаза, условия top of the line) или эксплуатационных факторов (периодическое смачивание стали или top of the line), а также для сравнительной оценки защитного функционала сформировавшихся продуктов коррозии.

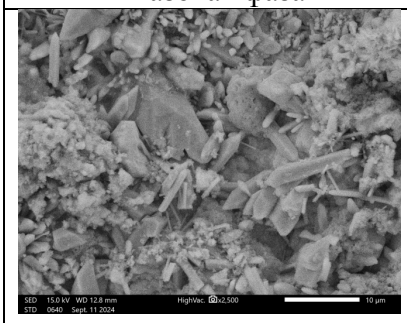
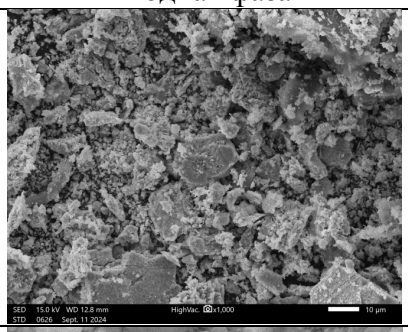
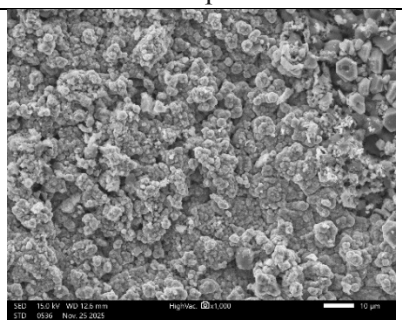
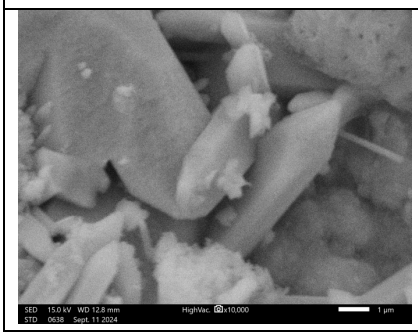
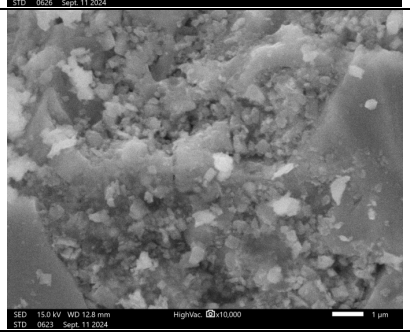
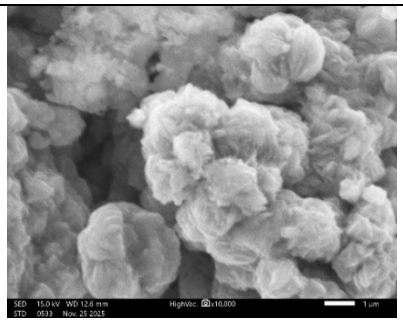
Газовая фаза	Водная фаза	Условия top of the line
		
		

Рис. 3. СЭМ-изображение осадков, полученных после испытаний в сероводородных условиях

Литература

1. Р.Р. Кантюков, Д.Н. Запевалов, Р.К. Вагапов. Исследование влияния водорода на стали в сероводородсодержащих и других средах на газовых объектах. Известия ВУЗов. Черная металлургия, 2024, 67(1), 26-37.
2. R.K. Vagapov, D.N. Zapevalov. Corrosion activity of operating conditions for the steel equipment and pipelines in the plants extracting CO_2-containing gases. Metallurgist, 2021, 65(1-2), 50-61.
3. H. Mansoori, R. Mirzaee, F. Esmaeilzadeh et. al. Pitting corrosion failure analysis of a wet gas pipeline. Engineering Failure Analysis, 2017, 82, 16-25.
4. F. Shi, L. Zhang, J. Yang et al. Polymorphous FeS corrosion products of pipeline steel under highly sour conditions. Corrosion Science, 2016, 102, 103-113.
5. A. Matamoros-Veloza, R. Barker, S. Varga et. al. Iron calcium carbonate instability: structural modification of siderite corrosion films. ACS Applied Materials & Interfaces, 2020, 12(43), 49237-49244.

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОИМПУЛЬСНОЙ ОБРАБОТКИ НА КОРРОЗИОННУЮ СТОЙКОСТЬ КРИОКАТАНОГО НИКЕЛЯ

А.Х. Валеева, И.Ш. Валеев, Е.В. Автократова, О.Ш. Ситдиков, М.В. Маркушев

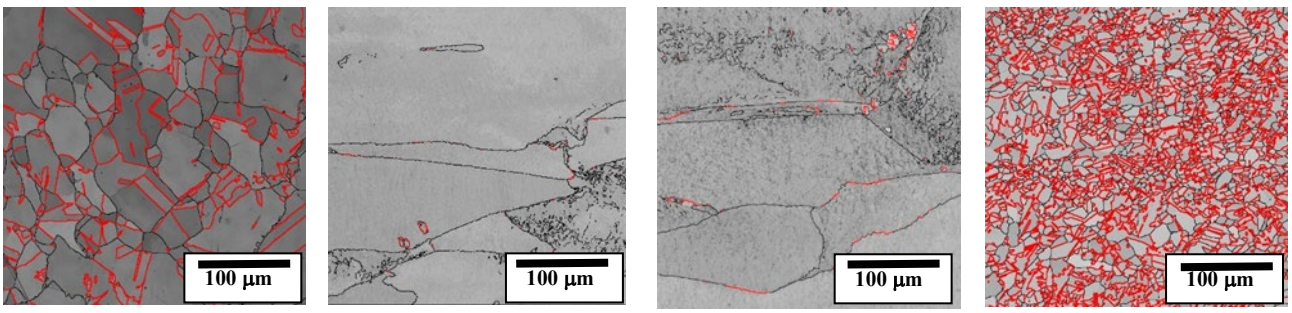
Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
valeevs@mail.ru

Никель благодаря уникальным физико-химическим свойствам является критически важным материалом для ряда высокотехнологичных отраслей промышленности. В частности, он широко используется при производстве изделий химической аппаратуры, электротехники и др., ключевым требованием к которым является их высокая коррозионная стойкость. Помимо контроля чистоты никеля, его коррозионная стойкость регламентируется структурным состоянием, определяемым технологией и режимами производственного цикла.

Цель работы - оценить влияние термомеханической обработки (ТМО), включающей интенсивную холодную деформацию и последующую электроимпульсную обработку (ЭИО), на структуру и коррозионную стойкость Ni 99.9.

Прокатку никеля проводили в изотермических условиях при температуре жидкого азота с суммарной степенью деформации 70%. Последующую ЭИО реализовали на образцах с размерами 20×4×0.4 мм, вырезанных вдоль направления прокатки, при интегральной плотности тока K_j в диапазоне от 0.80 до 1.27 $\times 10^4$ $А^2с/мм^4$. Микроструктуру анализировали в плоскости прокатки методом СЭМ-EBSD с использованием микроскопа TESCAN MIRA 3 LMH и программы HKL Channel 5 (методы обработки и анализа подробно описаны в [1,2]). Скорость коррозии оценивали по потере массы после выдержки 200 часов в 2н растворе серной кислоты.

Никель в состоянии перед криогенной прокаткой (КП) имел равновесную крупнозернистую структуру с долей двойниковых границ (Σ3 и Σ9) около 17% (рис.1а). В результате прокатки сформировалась развитая деформационная, ячеистая структура с небольшой долей новых ультрамелких зерен (рис.1б). При этом доля двойниковых границ приблизилась к 0. В процессе ЭИО с K_j вплоть до значений 1.22×10^4 $А^2с/мм^4$ отмечали возврат деформационной структуры (рис.1в) с незначительными изменениями спектра границ зерен. При больших значениях плотности тока активизировалась статическая рекристаллизация и после ЭИО с $K_j=1.27\times10^4$ $А^2с/мм^4$ фиксировали рекристаллизованную ультрамелкозернистую (УМЗ) структуру с размером зерна около 4 мкм и долей двойниковых границ почти 50% (рис.1г).



а б в г

Рис.1. Восстановленная структура Ni99.9 (а) - исходное состояние, (б) - после КП, (в и г) - после КП и ЭИО с $K_j=1.22\times10^4$ $А^2с/мм^4$ и с $K_j=1.27\times10^4$ $А^2с/мм^4$, соответственно. Высокоугловые границы обозначены черным цветом, двойниковые – красным.

Обнаружено, что никель с УМЗ структурой демонстрировал скорость коррозии заметно ниже, чем с исходной равновесной и деформированной (нагартованной) крупнозернистой структурой (рис.2).

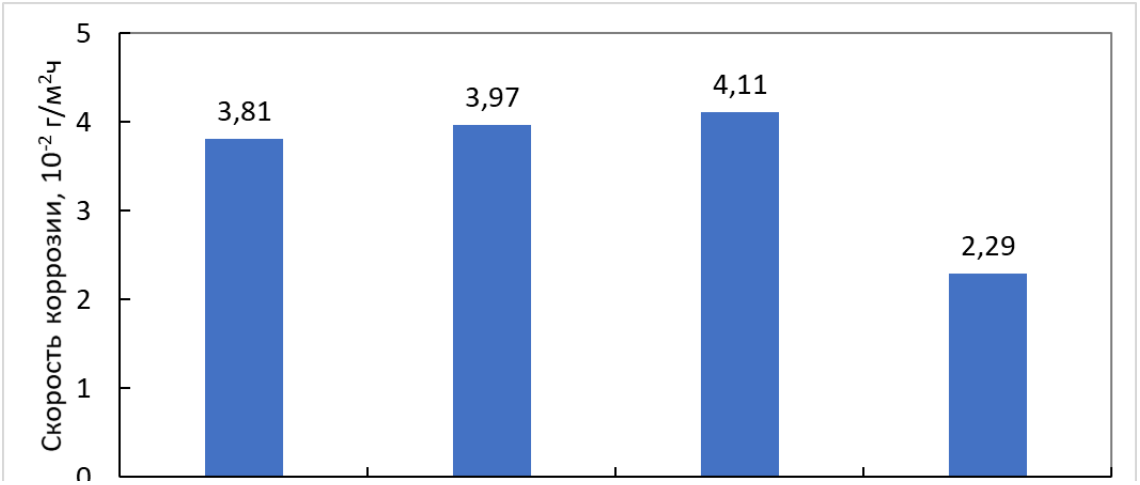


Рис.2. Скорость коррозии Ni в зависимости от его состояния (режима обработки)

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На примере крупнозернистого Ni 99,9 показано, что выбор способа и режимов ТМО является критически важным условием контроля параметров структуры, обеспечивающих наилучший баланс его механических свойств и коррозионной стойкости.

Нагартовка никеля при криогенной прокатке со степенью деформации 70% и формирование развитой дислокационно-ячеистой структуры с практически полным отсутствием двойников незначительно снижают его стойкость к коррозии при 200ч выдержке в 2н растворе серной кислоты. А последующая однократная ЭИО с плотностью тока K_j ≤1,22×10^4 А²·с/мм⁴, обеспечивающая лишь возврат деформационной структуры криокатаного Ni, еще больше усугубляет ситуацию.

Обработка никеля, сочетающая криогенную прокатку и ЭИО с интегральной плотностью тока K_j ~1,27×10^4 А²·с/мм⁴, позволяет придать ему рекристаллизованную структуру с размером зерна ~4 мкм и долей двойниковых границ (Σ3 и Σ9) почти 50 %, что значительно снижает скорость коррозии Ni. Решающую роль в повышении коррозионной стойкости играют два взаимосвязанных фактора: сильное измельчение зерен и высокая доля низкоэнергетических специальных границ.

Исследования проводили в рамках плановых работ по государственному заданию ФГБУН Института проблем сверхпластичности металлов РАН.

Литература

1. M.V. Markushev, I.S. Valeev, E.V. Avtokratova, R.R. Ilyasov, A.K. Valeeva, S.V. Krimsky, O.S. Sitdikov. Effect of strain of cryorolling on structure and strength of nickel // Lett. Mater., 2022, 12(4s) 409-413. https://doi.org/10.22226/2410-3535-2022-4-409-413.
2. M.V. Markushev, I.S. Valeev, E.V. Avtokratova, R.R. Ilyasov, A.K. Valeeva, S.V. Krimsky, O.S. Sitdikov. Effect of high-dense electropulsing with different energies on the structure and strength of nickel cryorolled to different strains // Lett. Mater., 2023, 13(2) 126-131. https://doi.org/10.22226/2410-3535-2023-2-126-131

ПРИМЕНЕНИЕ СВЕРХПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ С МЕЛКОЗЕРНИСТОЙ И УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОЙ СТРУКТУРОЙ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ РАЗЛИЧНЫХ ДЕТАЛЕЙ ГТД

В.А. Валитов

[1]*Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа*

Valitov_VA@imsp.ru

По результатам многолетних (более 30 лет) систематических исследований влияния условий деформационно-термической обработки на структуру и свойства никелевых суперсплавов с различным химическим и фазовым составом были выявлены закономерности формирования в таких материалах ультрамелкозернистой (УМЗ) и нанокристаллической (НК) структур дуплексного типа. Для никелевых сплавов с различным содержанием γ′-фазы определены температурные области формирования УМЗ структуры микродуплексного типа. Показано, что УМЗ структура типа микродуплекс образуется при температурах, при которых отношение ($f/d_{\gamma'}$) объемной доли (f) γ′-фазы к ее размеру ($d_{\gamma'}$) после гетерогенизирующего отжига изменяется в интервале $0{,}2<f/d_{\gamma'}\leq 0{,}8$, причем при значениях $f/d\gamma'\geq 0{,}4$ необходимо проведение деформации дробно с последеформационными отжигами в течение 4÷24 час. Показано, что с усложнением химического состава сплавов и увеличением содержания в них γ′ -фазы оптимальный температурный интервал формирования УМЗ структур типа микродуплекс смещается в сторону более высоких гомологических температур. Выявленные на примере горячедеформированных (горячепрессованных) суперсплавов закономерности формирования микродуплексной структуры являются общими также и для сплавов, изготовленных другими способами (литьем, методом порошковой металлургии).

Вышеприведенные результаты явились основой для разработки номограммы, построенной с использованием псевдобинарной диаграммы: один компонент которой - Ni, а другой - сумма элементов (Al+Ti), образующих γ′-фазу. Номограмма позволяет определить для выбранного суперсплава конкретные термомеханические режимы получения УМЗ структуры, например, микродуплексного типа с регламентированными параметрами.

Разработанная номограмма и ее составная часть - псевдобинарная диаграмма была доработана и расширена посредством включения в нее новых результатов, связанных с получением УМЗ структуры типа субмикродуплекс и НК структуры типа нанодуплекс, а также результатами исследований по влиянию таких структурных состояний на сверхпластические свойства суперсплавов. Это позволило охватить практически весь спектр микроструктурных состояний, которые могут быть получены в дисперсионно-твердеющих суперсплавах на никелевой и никельжелезной основе с регламентированными параметрами структуры дуплексного типа (от УМЗ типа микродуплекс вплоть до НК типа нанодуплекс) и рекомендовать оптимальные режимы термомеханической обработки для получения таких структур в конкретном суперсплаве, а также спрогнозировать оптимальные условия для сверхпластической деформации.

Практический опыт использования разработанной номограммы свидетельствует об эффективности прогнозирования конкретных термомеханических режимов получения УМЗ и НК структурных состояний в суперсплавах. При пользовании номограммой в большинстве случаев исследования сводятся к проверке на практике выбранных режимов обработки исходя только из данных химического состава, или даже из количественного содержания основных фазообразующих элементов (Al, Ti,), температуры растворения основной упрочняющей фазы и при необходимости к небольшой корректировке выбранных режимов. Это позволяет многократно уменьшить объем исследований при разработке режимов обработки по новым сплавам и тем самым значительно снизить материало- и трудозатраты.

По результатам механических испытаний было выявлено существенное влияние химического и фазового состава никелевых сплавов с предварительно подготовленной

мелкозернистой структурой типа микродуплекс (с размером зерен менее 10мкм) на сверхпластические (СП) свойства. Наибольшая пластичность в низколегированных сплавах ЭИ437 и ЭИ698 (имевших размеры γ и γ' фаз d_{γ}=3 и 6 мкм, $d_{\gamma'}$= 0,5 и 2,2 мкм) достигала соответственно значений 180 и 450% при скорости деформации $(5\div6{,}7)\cdot10^{-4}$ c^{-1} и температурах 900 и 950°С. Образцы из более легированных сплавов - ЭП742, ЭП962 и ЭП975 не разрушались даже после удлинения на 500÷700%, произведенного со скоростью $1{,}33\cdot10^{-3}$ c^{-1} при температурах: 1050, 1075 и 1100°С соответственно.

Установлено, что в дисперсионно-твердеющих сплавах (γ'; $\gamma''+\delta$) с УМЗ структурой (с размером зерен менее 1 мкм) наблюдается эффект низкотемпературной сверхпластичности, который проявляется при температурах на 200-250^{o}С ниже чем в материалах с мелкозернистой структурой. При этом достигается снижение уровня напряжения течения в 1,5-2 раза и рост скорости деформации на 1-1,5 порядка.

Предложены новые технологические процессы получения УМЗ структуры в изотермических и квазиизотермических условиях (с использованием теплоизолирующего контейнера), включая мелкозернистое, УМЗ и НК состояния, в объемных заготовках и в листовых материалах. Получены крупногабаритные заготовки для раскатки диаметром ϕ 400÷450 мм и штамповки (диаметром ϕ 500÷560 мм) и весом до 65÷120кг с мелкозернистой структурой из российских никелевых сплавов ЭИ698, ЭП742, ЭК79, ЭП962, ЭП975 и зарубежных никелевых сплавов Waspaloy, Astroloy, Rene 88 и Inconel 718. Новизна технологий подготовки УМЗ структуры защищена рядом патентов РФ (2041284, 2119842, 2269585), и 1 зарубежным (European Patent EP 0909339 B1).

Разработан ряд новых технологий получения осесимметричных деталей ответственного назначения из УМЗ полуфабрикатов, методами локального формообразования в условиях СП, в том числе:

а) ротационной вытяжки в режиме СП сложнопрофильных тонкостенных дисков с глубокими поднутрениями из никелевого сплава типа Inconel 718 с однородной мелкозернистой структурой и высоким комплексом механических свойств (патент РФ № 2187403);

б) раскатки в условиях СП сложнопрофильных осесимметричных деталей типа дисков ГТД из никелевого сплава типа ЭП962, которые после окончательной термообработки полностью удовлетворяют требованиям технических условий и успешно прошли ресурсные испытания на опытном двигателе.

в) Разработан метод формирования регламентировано – изменяющейся по радиусу диска структуры, посредством создания градиентного температурного поля заготовки с исходной УМЗ структурой при её раскатке в режиме СП. Результаты исследований стали предметом ряда изобретений (патенты РФ: 2119842, 2134175; European Patents: EP 0912270 B1, EP 0909 339 B1; United States Patent No 6158261.

На основе проведенных исследований был создан существенный научно-технический задел (защищен патентами РФ: 2608118, 2706925), который будет востребован при разработке инновационных деформационных технологий на базе использования эффекта сверхпластичности для получения биметаллических деталей ГТД («БЛИСК», диск-вал) с функционально-градиентными свойствами.

ТИТАНОВЫЕ СПЛАВЫ ДЛЯ ПРУЖИН

Н.П. Волкова, А.В. Волков, А.С. Гребеньщиков, М.О. Ледер

ПАО «Корпорация ВСМПО-АВИСМА», г. Верхняя Салда
volkova_np@vsmpo.ru

Использование сплавов титана для изготовления пружин позволяет снизить вес конструкции по сравнению со сталью, благодаря повышенной удельной энергоемкости в сочетании с высокой удельной прочностью и коррозионной стойкостью, поэтому сплавы титана находят применение как в авиакосмических приложениях, так и в спортивных автомобилях и мотоциклах.

Для того чтобы выигрыш в массе и удельной энергоемкости был существенным, необходимо обеспечение высокого уровня прочности на сдвиг. Пружины из среднепрочных сплавов, например, широко используемого в промышленности сплава Ti6Al4V, не позволяют получить выигрыша в массе по сравнению со стальной пружиной, из-за относительно низкой прочности на кручение, поэтому использование сплава Ti6Al4V для этих целей нецелесообразно. В связи с этим актуальным является сравнительное исследование характеристик пружин из высокопрочных титановых сплавов.

При повышении прочности материалы резко теряют пластичность, приближаясь к хрупкому состоянию, что недопустимо в конструкции пружины, так как в некоторых рабочих состояниях материал пружины переходит в упругопластическую область (например, заневоливание). Пластичность очень сильно зависит от напряжённо-деформированного состояния материала, поэтому нельзя переносить данные пластичности с растяжения на кручение. Задача создания высокопрочного материала для пружин сочетает в себе обеспечение повышенной прочности и минимального уровня пластичности на кручение.

При работе пружин в конструкции усталость является наиболее характерной причиной выхода из строя пружин, поэтому важно знать и учитывать предел выносливости как материала, так и конструкции в целом и закладывать необходимые корректировки на этапе проектирования пружины.

Разработан способ получения высокопрочных состояний материала для использования в пружинах, которые позволяют получать снижение массы до 2 раз при увеличении удельной энергоемкости до 3,2 раза при близком уровне усталостной прочности (напряжение $0{,}55\tau_{0,3}$ при базе N=105 циклов R=0,1) относительно стальных пружин.

В процессе работы была успешно произведена опытная партия пружин, что подтверждает технологичность металла при навивке пружины и промышленную применимость способа изготовления пружин из высокопрочных титановых сплавов.

Испытание пружин при сжатии с нагрузками, превышающими рабочие, показало, что накопленная деформация после 700 часовой выдержки, не превысила 0,5%. Это свидетельствует о возможности использования пружин из титановых сплавов для условий долговременных нагрузок. Испытание на усталость пружин показало, что пружины, выполненные из высокопрочных титановых сплавов, имеют отличное сопротивление усталостному разрушению.

МИКРОСТРУКТУРА И ПРОЧНОСТЬ ТВЕРДОФАЗНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ЭП975//ВКНА-1В

Р.Р. Габбасов, Э.В. Галиева, В.А. Валитов

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
awesome.radim@yandex.ru

В области авиационного двигателестроения одним из приоритетных направлений является разработка технологических решений, направленных на увеличение эксплуатационного ресурса и повышение характеристик газотурбинных двигателей и силовых установок [1]. Одним из перспективных направлений является создание комбинированных конструкций, сочетающих жаропрочные никелевые сплавы и интерметаллидные сплавы на основе Ni_3Al [2]. Примером такой детали может послужить деталь типа «блиск», в которой комбинирование жаропрочного никелевого сплава в дисковой части и сплава на основе интерметаллидной фазы Ni_3Al в лопаточной зоне позволяет оптимизировать конструкцию при сохранении требуемого уровня прочности и жаростойкости. Одним из перспективных способов получения соединения является твердофазная сварка [3].

В данной работе проводилось исследование твердофазного соединения жаропрочного никелевого сплава ЭП975 с интерметаллидным сплавом ВКНА-1В на основе Ni_3Al. Микроструктурные исследования и оценка механических свойств проводились на базе научно-исследовательского оборудования ЦКП ИПСМ РАН «Структурные и физико-механические исследования материалов». Эксперимент по твердофазной сварке проводился при 1125 °С и начальной скорости деформации 10^{-4} $с^{-1}$. При анализе микроструктуры твердофазного соединения ЭП975//ВКНА-1В установлено, что между соединяемыми сплавами видна четкая линия, вдоль которой, наблюдается непрерывная цепочка частиц, предположительно являющимися оксидами. Структура сплава ЭП975 сохраняется мелкозернистой. Со стороны монокристалла выявлена область шириной около 5 мкм, в которой обнаружены как малоугловые, так и высокоугловые границы. Твердофазная сварка сопровождалась диффузией легирующих элементов, таких как Al, Co, Cr из сплава ЭП975 в интерметаллидный сплав ВКНА-1В. Ширина диффузионной зоны составила 38 мкм. По результатам механических испытаний на растяжение кратковременная прочность сварных образцов ЭП975//ВКНА-1В составила 500 МПа.

Литература

1. R. C. Reed. The superalloys: Fundamentals and Applications. Cambridge University Press, 2006. 372 p.
2. K.B. Povarova, V.A. Valitov, S.V. Obsepyan, A.A. Drozdov, O.A. Bazyleva, E.V. Valitova Study of the properties and the choice of alloys for bladed disks (blisks) and a method for their joining. Russian Metallurgy, 2014, 2014(9) 733-741.
3. E.V. Galieva, A.A. Tagirova, R.R. Gabbasov, V.A. Valitov. Effect of heat treatment on the microstructure and properties of solid-state joints of dissimilar Ni-based Superalloys. Lett. Mater., 2025, 15(4) 376-382.

МАГНИТОЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ МАРТЕНСИТНОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ И МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В СПЛАВЕ $Ni_{50}Mn_{18.5}Ga_{25}Cu_{6.5}$, ПОДВЕРГНУТОМ ВСЕСТОРОННЕЙ ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ КОВКЕ

Р.Ю. Гайфуллин[1], М.И. Нагимов[1], В.И. Митюк[2], А.М.Алиев[3], А.А. Мухучев[3], А.Т. Кадырбардиев[3], И.И. Мусабиров[1]

[1]*Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа, Россия*
[2]*ГО "НПЦ НАН Беларуси по материаловедению", Минск, Беларусь*
[3]*Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия*
gaifullin_1998@bk.ru

Развитие технологий твердотельного магнитного охлаждения требует создания экологически безопасных материалов с управляемыми функциональными свойствами. Сплавы Гейслера системы Ni-Mn-Ga перспективны с точки зрения практического применения благодаря гигантскому магнитокалорическому эффекту (МКЭ) и эластокалорическоскому эффекту (ЭКЭ). В частности, особый интерес привлекают сплавы Гейслера системы Ni-Mn-Ga-Cu, поскольку частичная замена Mn на Cu снижает температуру Кюри и сдвигает мартенситный переход в сторону более высоких температур, что приводит к наложению этих температур друг на друга и происходит магнитоструктурный фазовый переход [1–2]. Также показано, что для реализации магнитоиндуцированного мартенситного фазового перехода в литом сплаве системы Ni-Mn-Ga-Cu необходимы достаточно низкие поля величиной 3-4 Тл, что указывает на их высокую чувствительность к внешнему магнитному полю [3].

Однако, несмотря на высокие значения функциональных свойств сплавов системы Ni-Mn-Ga-Cu, их практическому применению препятствует низкая механическая прочность. При термоциклировании в интервале температур мартенситного превращения под действием напряжений образец сплава разрушается. Известно, что повышение механических свойств материала наиболее эффективно достигается за счет деформационно-термической обработки (ДТО). Однако в случае со сплавами Гейслера необходимо учитывать, что ДТО может значительно уменьшить величину функциональных эффектов. Поэтому структура сплава после ДТО должна иметь не только повышенную прочность, но и обеспечить достаточную величину функционального эффекта.

В настоящей работе представлены результаты исследования влияния всесторонней изотермической ковки (ВИК) на микроструктуру, магнитные свойства и магнитокалорический эффект в сплаве $Ni_{50}Mn_{18.5}Ga_{25}Cu_{6.5}$.

В результате ДТО методом ВИК исходная микроструктура сплава, характеризующаяся крупными равноосными зернами размером 300 мкм, трансформируется в бимодальную микроструктуру типа «ожерелье», в которой крупные зерна размером ~200 мкм окружены прослойкой мелкозернистой структуры. Сравнительный микроструктурный анализ сплава после ВИК по двум различным схемам выявил схожую морфологию структуры. Основное различие заключается в среднем размере зерен мелкозернистой прослойки. В образце, деформированном при 700°C, средний размер рекристаллизованных зерен составил ~15 мкм. В то же время в случае образца, подвергнутого ковке при 700°C с последующим понижением температуры деформации до 600°C на заключительных этапах осадки, размер зерен составил ~7 мкм.

Совокупный анализ температурной зависимости намагниченности и данных дифференциальной сканирующей калориметрии позволяет сделать вывод, что во всех структурных состояниях мартенситное и магнитное фазовые превращения накладываются друг на друга и наблюдается магнитоструктурный фазовый переход.

Анализ температурных зависимостей намагниченности, измеренных в магнитных полях от 100 мТл до 8 Тл, показал, что во всех структурных состояниях наблюдается

смещение критических температур магнитоструктурного фазового перехода в высокотемпературную область. Данный сдвиг обусловлен стабилизацией ферромагнитной мартенситной фазы, обладающей существенно более высокой намагниченностью по сравнению с парамагнитным аустенитом.

Результаты исследования магнитокалорических свойств показали, что в магнитном поле 1,8 Тл в процессе прямого мартенситного превращения пиковое значение адиабатического изменения температуры сплава в исходном состоянии составляет ΔT_{ad} = 1,2 К. После ВИК при 700°С величина МКЭ возрастает до ΔT_{ad} = 1,37 К. В то же время для образца, деформированного по схеме с понижением температуры до 600°С, зафиксировано снижение эффекта до ΔT_{ad} = 0,95 К.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИПСМ РАН.

Литература

1. X. Zhang, M. Qian, Z. Zhang, L. Wei, Lin Geng, J. Sun. Magnetostructural coupling and magnetocaloric effect in Ni-Mn-Ga-Cu microwires. Applied Physics Letters, 2016, 108 (5), 52401.
2. F. Li, D. Zhao, J. Liu, A. Kamantsev, E. Dilmieva, Yu. Koshkid'ko, C. Zhu, L. Ma, C. Zhen, D. Hou. Entropy change of magnetostructural transformation and magnetocaloric properties in a $Ni_{50}Mn_{18.5}Ga_{25}Cu_{6.5}$ Heusler alloy. Materials Research Bulletin, 2023, 158, 112050.
3. D. Zhao, T. Castan, A. Planes, Z. Li, W. Sun, W. Sun, J. Liu. Enhanced caloric effect induced by magnetoelastic coupling in NiMnGaCu Heusler alloys: Experimental study and theoretical analysis, Physical Review B, 2017, 96 (22), 224105.

ВЛИЯНИЕ СКРЕПЛЯЮЩЕГО СЛОЯ НА ДИНАМИКУ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ПРИ ПОСТОЯННОЙ НАГРУЗКЕ

Л.Х. Галиахметова, Р.Т. Мурзаев, Ю.А. Баимова

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
rysaeva.l.h@gmail.com

С момента открытия углеродные нанотрубки (УНТ) привлекают большое внимание во многих областях науки и технологий. УНТ обычно имеют длину 1–10 мкм. Углеродные нанотрубки могут обладать замечательными свойствами, такими как исключительная прочность на разрыв и теплопроводность, благодаря своей структуре и прочности связей между атомами углерода. Некоторые структуры одностенных углеродных нанотрубок обладают высокой электропроводностью, в то время как другие являются полупроводниками. Химическая связь УНТ состоит только из sp^2-связей, которые встречаются в графите. Структура связей молекул придает им прочность - она лучше, чем sp^3-связи, встречающиеся в алмазах. Трубки склонны к агломерации или объединению в пучки из-за большой площади поверхности. Благодаря своим уникальным свойствам УНТ применяются для создания защитных пленок, аэрогелей, порошков и пр.

В данной работе была рассмотрена модель одностенных углеродных нанотрубок с несколькими начальными состояниями: (1) две УНТ расположенные перпендикулярно друг другу, (2) перпендикулярно расположенные УНТ с одним слоем листов графена в области тройного стыка, и (3) нанотрубки скреплённые перпендикулярно сращенными нанотрубками меньшей длины, чем основные нанотрубки. Для изучения модели были подобраны нанотрубки, наиболее часто получаемые экспериментальным путем, а именно, длиной около 20 нм, и диаметром от 1,4 до 2 нм [1]. При этом стоит отметить, что расстояние между слоями листов графена вокруг нанотрубок будет приблизительно 3,4 Å, как в графите. Диаметр коротких сращенных нанотрубок подбирался по тем же критериям.

Целью работы является изучение влияние скрепляющего слоя на динамику углеродных нанотрубок при приложении постоянной нагрузки в режиме pull-out (или вытягивание), а именно расстояние на которое сместиться УНТ. Исследование проводилось методом молекулярной динамики с использованием пакета LAMMPS. Для воспроизведения межатомных связей применяется хорошо известный потенциал AIREBO. Моделирование процесса вытягивания нанотрубок рассматривалось в нескольких режимах: движение с постоянной скоростью и движение с постоянной силой. Для каждого режима были проанализированы расстояние, на которое сместилась УНТ, влияние скрепляющего слоя на перемещение и определены начальные параметры для начала движения нанотрубок.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИПСМ РАН

Литература

1. J.A. Ramirez B., D. V. Krasnikov, H. A. Butt, V. A. Dmitrieva, et. Ethylene-induced welding of single-walled carbon nanotube films to enhance mechanical and optoelectronic properties. Carbon, 2025, 238, 120230.

МИКРОСТРУКТУРА И СВОЙСТВА ТВЕРДОФАЗНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ С ИНТЕРМЕТАЛЛИДНЫМИ СПЛАВАМИ НА ОСНОВЕ Ni_3Al

Э.В. Галиева

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
galieva_elvina_v@mail.ru

В настоящее время в области материаловедения значительное внимание уделяется исследованию механизмов формирования твердофазных соединений (ТФС) между никелевыми и интерметаллидными сплавами на основе Ni_3Al. Для получения ТФС применяются диффузионная сварка, сварка трением, диффузионная пайка и др. Следует отметить, что сварка трением имеет ограниченное применение при соединении жаропрочных монокристаллических никелевых сплавов, поскольку в данном случае нарушается монокристаллическая структура [1, 2]. Одним из перспективных методов получения твердофазных соединений из высоколегированных, в том числе интерметаллидных сплавов, является сварка давлением в температурно-скоростных условиях сверхпластичности. Такой способ соединения исключает возникновение в зоне ТФС термических и фазовых напряжений и обеспечивает сохранение исходной структуры соединяемых материалов [3, 4].

В данной работе обобщены результаты многолетних исследований, посвящённых получению твердофазных соединений между жаропрочными никелевыми сплавами (ЭК61, ЭП975) и интерметаллидными сплавами на основе Ni_3Al (ВКНА-25, ВКНА-моно) [2-4]. Экспериментально доказана эффективность сварки давлением в температурно-скоростных условиях сверхпластичности для получения качественных ТФС из жаропрочных сплавов и иинтерметаллидов на основе никеля. Установлено, что для получения качественного соединения достаточно, чтобы в жаропрочном никелевом сплаве был реализован эффект сверхпластичности. Исследовано влияние температуры, степени деформации, а также исходной микроструктуры на закономерности формирования градиентных структур в зоне ТФС и прочность сварных образцов. Показано, что повышение температуры и степени деформации приводит к снижению пористости и более равномерному распределению легирующих элементов в диффузионной зоне. По результатам механических испытаний установлено, что увеличение температуры сварки приводит к повышению механических свойств сварных образцов. Оптимальной степенью деформации для жаропрочного никелевого сплава является $\varepsilon = 30$ %, поскольку дальнейшее увеличение деформации не обеспечивает существенного прироста прочности. Прочность сварных образцов соответствует уровню 0,7-1 $\sigma_в$ относительно прочности интерметаллидного сплава ВКНА-25.

Литература

1 O.T. Ola, O.A. Ojo, P.Wanjara, M.C. Chaturvedi. A study of linear friction weld microstructure in single crystal CMSX–486 superalloy. Metall. Mater. Trans. A., 2012, 43 921–933.
2. T. Ma, M. Yan, X. Yang, W. Li, Y. J. Chao Microstructure evolution in a single crystal nickel–based superalloy joint by linear friction welding. Mater. Design., 2015, 85 613–617.
3. A.A. Drozdov, K.B. Povarova, V.A. Valitov, E.V. Galieva, E.G. Arginbaeva, O.A. Bazyleva, M.A. Bulakhtina, A.N. Raevskikh. Effect of the Temperature of Pressure Welding of a Wrought EP975 Nickel Alloy and a Single-Crystal Intermetallic VKNA-25 Alloy on the Structure and Properties of the Welded Joints. Russian Metallurgy (Metally), 2020, (7) 752–759.
4. E.V. Galieva, E.Y. Klassman, V.A. Valitov, R.R. Gabbasov, A.A. Tagirova, E.M. Stepukhov. Microstructure and strength of solid-state joints of dissimilar nickel-based alloys. Lett. Mater., 2024, 14 (4) 453-459.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТВЕРДОФАЗНОЙ СВАРИВАЕМОСТИ ТИТАНОВОГО И МАГНИЕВОГО СПЛАВОВ

А.К. Галимов, Р.Я. Лутфуллин, М.Х. Мухаметрахимов

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа, Россия
amirtab@mail.ru

Известно [1], что в общем случае, процесс сварки в твердом состоянии кристаллических материалов состоит из трех стадий: I – образование физического контакта, II – активация контактных поверхностей, III – объемное развитие взаимодействия. В настоящее время отсутствует научно-обоснованная гипотеза формирования твердофазного соединения (ТФС) при сварке разнородных металлов, в частности, нерастворимых в твердом состоянии и не образующих химическое соединение при нагреве. Между тем при изготовлении легких и жестких конструкций для авиакосмической промышленности перспективными и востребованными являются титан-магниевые композиты в силу уникальных свойств исходных компонентов [2]. Однако серьезным проблемным вопросом остается возможность технологического достижения надежного неразъемного соединения между титановыми и магниевыми сплавами. Титан и магний не вступают в химическую реакцию друг с другом и являются практически нерастворимыми. Однако, при этом, существует теоретическая возможность их межатомного взаимодействия на уровне физического контакта свариваемых поверхностей на расстоянии, сравнимом с периодом их кристаллических решеток.

Факторами, способствующими значительным силам межатомного притяжения, а значит и схватыванию поверхностей являются обменные процессы между внешними электронами возбужденных поверхностей атомов. В результате такого взаимодействия образуются энергетически устойчивые конфигурации электронов, присущие невозбужденным атомам внутри тела. При расстоянии между атомами $r=a$, где a – период кристаллической решетки, граница раздела между контактирующими поверхностями титанового и магниевого сплава исчезают и два соединяемые поверхности объединяются в одну поверхность раздела – происходит их схватывание (сварка), а потенциальная энергия системы достигает минимума $E_{\min}$ [3]. Этот минимум соответствует равновесию системы, которая термодинамически всегда стремится к состоянию с минимальной свободной энергией. Энергия $E_{\min}$ равна свободной энергии $2F_{\text{п}}$ двух исчезающих (соединяемых) поверхностей раздела.

В процессе соединения поверхностей двух поликристаллов требуется образование активных центров, а при жестко направленных связях – и взаимная подстройка атомов на контактирующих поверхностях, приводящая к исчезновению двух отдельных поверхностей раздела поликристаллов и образованию границы между зернами с различно ориентированными кристаллографическими осями. Вблизи такой границы, как правило, имеются упругие искажения решетки в узкой приграничной области шириной в несколько атомных слоев, связанные с затратами энергии системы $F_{гр}$. Термодинамическое схватывание (сварка) поликристаллов возможно в том случае, если оно приведет к уменьшению свободной энергии системы.

Строение границы зерна и ее энергия $F_{гр}$ определяются характером и степенью разориентировки образующих ее кристаллов. Они могут быть наклонены друг к другу с симметричным или ассиметричным расположением границы сопряжения, причем каждый из кристаллов может быть повернут на произвольный угол относительно любой из трех пространственных осей. Строение простейшей симметричной наклонной границы с небольшим углом разориентировки ($\theta < 15^{\circ}$) характеризуется рядом дислокаций с шагом

$$D = \frac{a}{\theta}$$

Если при схватывании разноименных материалов в результате электронного обмена между атомами соединяемых металлов и сплавов повышается статистический вес и устойчивость электронных конфигураций, то такой процесс идет с выигрышем энергии и его реализация термодинамически наиболее вероятна.

Из изложенного выше следует вывод, что для металлов процесс схватывания, как правило, сопровождается уменьшением свободной энергии системы и термодинамически выгоден. В этой связи целесообразно разграничить два понятия – схватывание как процесс образования связи между твердыми телами, т. е. первичный акт сварки, и сварка как процесс получения прочного соединения (силы Ван дер Ваальса монотонно перейдут в межатомное притяжение).

Рассматриваемая математическая модель включает в себя системы дифференциальных уравнений и их конечно разностной аппроксимации, сил межатомного взаимодействия, начальных и граничных условий, определяемых характером описываемого процесса и используемыми в модели соотношениями [4]. На основе приведенных в упомянутой работе принципов, в модели все атомы представлены материальными точками. Их движение, в рамках методов молекулярной динамики, описывается законами Ньютона. Соответствующие уравнения движения частиц имеет вид:

$$\begin{cases} m_i \dfrac{d\vec{v}_i}{dt} = \vec{F}_i + \vec{F}_i^{ext} \\ \dfrac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i \end{cases}$$

где m_i, $m_i, \vec{v}_i, \vec{r}_i$ – масса, скорость и радиус-вектор соответственно; $\vec{F}_i$ – сила взаимодействия с остальными частицами, $\vec{F}_i^{ext}$ – сила взаимодействия с внешними полями, i=1…N; N – количество частиц.

Конечно-разностная аппроксимация [5] этой системы основывается на дискретизации переменной времени t, и связи временных слоев соотношением

$$t^{\tau+1} = t^{\tau} + \Delta t^{\tau},$$

где τ – номер временного слоя, а Δt^{τ} – шаг по времени на текущем временном слое t^{τ}.

Величину вектора скоростей v_i на следующем временном слое τ+1 можно оценивать, используя дифференциальное приближение этой величины

$$\vec{v}_i^{\tau+1} = \vec{v}_i^{\tau} + \Delta\vec{v}_i^{\tau} + O(\vec{v}_i^{\tau})$$

Тогда учитывая приближение рядом Тейлора в окрестности величины $\vec{v}_i^{\tau}$ первого уравнения рассматриваемой системы [6], разностное аппроксимация рассматриваемой системы уравнений примет вид:

$$\begin{cases} m_i \dfrac{\vec{v}_i^{\tau+1} - \vec{v}_i^{\tau}}{\Delta t^{\tau}} = \vec{F}_{Ti}^{\tau} + \dfrac{\partial \vec{F}_{Ti}}{\partial x}(x_i^{\tau+1} - x_i^{\tau}) + O(\Delta t^2, \Delta\rho^2) \\ \dfrac{\vec{r}_i^{\tau+1} - \vec{r}_i^{\tau}}{\Delta t^{\tau}} = \vec{v}_i^{\tau} \end{cases}$$

где $\vec{F}_{Ti}^{\tau} = \vec{F}_i^{\tau} + \vec{F}_i^{\tau,ext}$, а $\Delta\rho$ – скалярная величина, длина приращения скорости v_i.

Эти соотношения позволяют осуществлять количественный анализ сил межатомного взаимодействия на поверхностях титанового и магниевого сплавов, а также соотношения потенциалов на этих поверхностях для оценки сил сцепления (их схватываемости) под прилагаемым внешним воздействием на свариваемые образцы.

Проведенные на основании наших рассуждений эксперименты по твердофазной сварке давлением в вакууме магниевого сплава AZ31 с титановым сплавом ВТ14 в интервале температур 380 – 530 °С показали принципиальную осуществимость твердофазной сварки исследуемых сплавов на уровне адгезионного схватывания при достижении физического контакта соединяемых поверхностей (рис. 1).

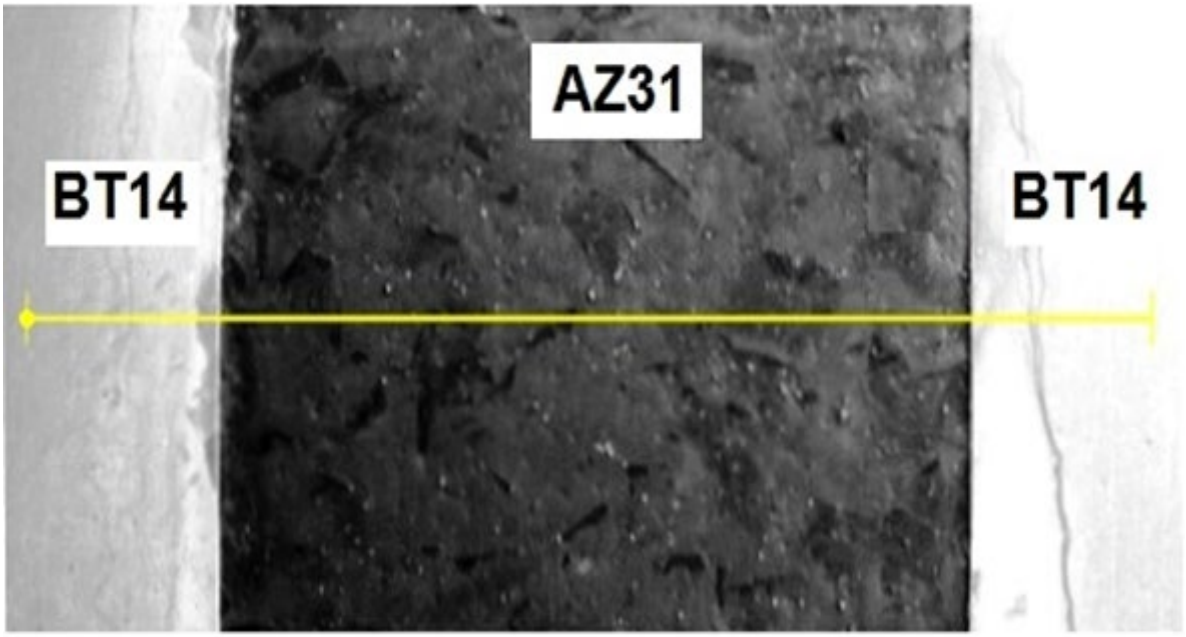


Рис. 1. Участок твердофазного соединения титанового сплава ВТ14 и магниевого сплава AZ31 после сварки давлением при температуре 380 °С

Финансирование работы. Работа выполнена в рамках государственного задания ИПСМ РАН, НИОКТР № 124022900007-9.

Литература

1. Ю.Л. Красулин. Взаимодействие металла с полупроводником в твердой фазе. М.: Наука, 1971. 119 с.
2. Fanjin Yao, Guoqiang You, Lei Wang, Qi Li, Sheng Zeng, Yue Ming. Design, fabrication, microstructure, and mechanical properties of interlayer-free vacuum diffusion bonding Mg/Ti composites. Vacuum, 199 (2022) 110947.
3. А.С. Гельман. Основы сварки давлением. М.: Машиностроение, 1970. 312 с.
4. М.Н. Семенова, А.С. Семенов, Ю.В. Бебихов, И.А. Якушев. Математическое моделирование физических процессов в металлических кристаллических решетках. Вестник СВФУ, 2021, 4 (84) 17-25.
5. С.К. Годунов, В.С. Рябенький. Введение в теорию разностных схем. М.: Физматлит, 1962. 340 с.
6. Г.Н. Зверев. Теоретическая информатика и ее основания. М.: Физматлит, 2008. 576 с.

СОПРОТИВЛЕНИЕ УСТАЛОСТИ УГЛЕ-АЛЮМИНИЕВОГО КОМПОЗИТА

С.Н. Галышев

ФГБУН Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна Российской академии наук, г. Черноголовка
galyshew@ya.ru

Исследовано влияние базы испытаний на усталость и величины деформации цикла на падение напряжения в процессе циклического нагружения и остаточную прочность композитной проволоки с сильными и слабыми границами между матрицей и волокном. Исследованы поверхности разрушения после испытаний на остаточную прочность. Установлено что образцы композита с сильными границами разрушаются на базе выше 20*10^4 циклов при деформации цикла 1,1%, что соответствует напряжению около 600-650 МПа. При меньших величинах деформации образцы с сильными границами не разрушились вплоть до 10^6 циклов. Также установлено, что образцы со слабыми границами не разрушились даже при наибольшей базе испытаний и величине деформации цикла, которая была равна 3%. Характерной особенностью композита со слабыми границами является то, что в процессе циклического нагружения происходит плавное уменьшение напряжения, которое пропорционально величине деформации цикла. При этом экспериментальные данные, указывают на то, что падения напряжения практически отсутствует при деформации 1,7-1,8%, что соответствует напряжению на уровне 900-1000 МПа. В первом приближение эта величина может быть принята за предел выносливости композита со слабыми границами, что более чем в 3 раза превосходит предел выносливости наиболее распространенных алюминиевых сплавов.

Уменьшение остаточной прочности композита со слабыми границами после испытаний на базе 10^6 циклов при деформации цикла 2,1 % наименьшее по сравнению с исходной, величина остаточной прочности равна около 2100 МПа. При деформации цикла 2,5% падение остаточной прочности с ростом числа циклов до 10^5, включительно, происходит менее резко, чем при деформации цикла 3%. Однако, на базе 10^6 циклов, остаточная прочность при этих деформациях практически не отличается, а её величина равна около 800 МПа. Характерной особенностью композита с сильными границами является то, что вне зависимости от числа циклов, в отличие от композита со слабыми границами, падения напряжения практически не наблюдается. При этом деформация цикла 1,1%, которой соответствует напряжение около 650 МПа, приводит к разрушению на базе выше 20*10^4 циклов. При деформации меньше 0,95 %, которой соответствует напряжение 550 МПа, на базе 10^6 циклов разрушение не происходит. Величина напряжения 550-600 МПа в первом приближении может быть принята за предел выносливости композита с сильными границами, что практически в 2 раза превосходит предел выносливости наиболее распространенных алюминиевых сплавов.

Исследование поверхностей разрушения композита со слабыми границами показало, что в процессе циклического нагружения в нейтральной плоскости образца, где сосредоточены наибольшие сдвиговые напряжения, происходит накопление повреждений в том числе за счет сдвиговых напряжений. Сравнение с композитом с сильными границами, для которого характерно отсутствие признаков расслоения в нейтральной плоскости, отсутствие падения напряжения в процессе циклического нагружения, постоянство остаточной прочности и модуля упругости после циклического нагружения указывает на то, что падение напряжения при циклическом нагружении композита со слабыми границами вероятнее всего связано с локальным расслоением в нейтральной плоскости под действием касательных напряжений.

Работа выполнена в рамках проекта РНФ 22-79-10064-П

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОМПОЗИТОВ ГРАФЕН-НАНОЧАСТИЦЫ ОЛОВА

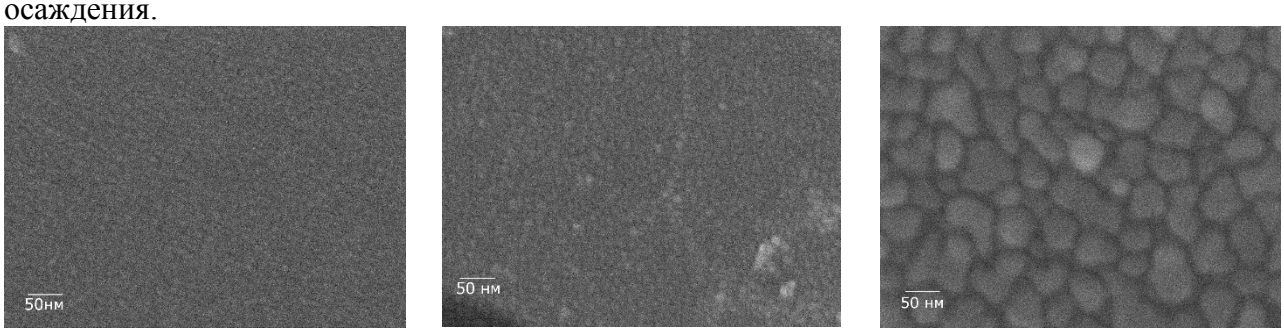
Т.И. Гареев, Д.В. Смовж

Институт теплофизики СО РАН, Новосибирск
t.gareev25@gmail.com

Функционализация поверхности графена является важным этапом при создании материалов с заданными свойствами. Магнетронное распыление представляет собой перспективный метод модификации благодаря его масштабируемости и отсутствию загрязнения поверхности. В отличие от химических методов, данный подход не приводит к загрязнению поверхности. В настоящей работе исследуется влияние магнетронного распыления олова на структурные и электрические свойства графена, полученного методом CVD, а также особенности формирования наночастиц на его поверхности.

Графен был синтезирован методом химического осаждения из газовой фазы (CVD) на медной подложке с последующим переносом на SiO_2. Контакты для определения электрофизических свойств образцов были нанесены на поверхность графена методом магнетронного распыления. Осаждение олова проводилось при давлении 1 Па и фиксированных параметрах разряда: токе I = 100 мА и напряжении U = 600 В. Были получены образцы с различной среднемассовой толщиной слоя олова — 3, 5 и 16 нм, соответствующей времени осаждения 5, 10 и 30 секунд соответственно. Морфология поверхности исследовалась методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) с последующей обработкой изображений для определения среднего размера частиц и функции распределения частиц по размерам. Электрические свойства оценивались путем измерения сопротивления образцов до и после осаждения.

Показано (рис. 1), что при малых толщинах олова формируется однородное островковое покрытие. С увеличением толщины наблюдается начальный режим вертикального роста, за которым следуют коалесценция островков и переход к формированию более сплошной пленки. Анализ СЭМ-изображений выявил увеличение среднего размера частиц и изменение морфологии покрытия с увеличением времени осаждения.



а б в

Рис. 1. СЭМ композитов со среднемассовой толщиной 3 нм (а), 5 нм (б) и 16 нм (в)

Измерения сопротивления показали, что в результате бомбардировки поверхности высокоэнергетическими частицами сопротивление графена увеличивается вследствие образования дефектов. Однако данная зависимость является нелинейной (рис. 2): для образца с максимальной толщиной олова (Sn-30) относительное изменение сопротивления оказывается меньше, чем для промежуточного образца (Sn-10). Эксперимент по бомбардировке поверхности графена ионами инертного газа (Ar) с одновременным in situ измерением сопротивления показал линейное увеличение сопротивления с продолжительностью ионного воздействия. Дополнительные in situ измерения сопротивления пленки олова, осажденной в аналогичном режиме, показали, что ее вклад в

общую проводимость пренебрежимо мал вследствие относительно высокого сопротивления (порядка 10 кОм при толщине 16 нм) по сравнению с сопротивлением графена. Нелинейное изменение сопротивления может быть объяснено следующим образом. С увеличением времени осаждения относительное изменение сопротивления постепенно насыщается, поскольку сформированный на поверхности слой олова выполняет роль защитного барьера, препятствующего дальнейшему структурному повреждению графена. В результате поступающий поток материала взаимодействует преимущественно с уже сформированным оловянным покрытием, а не непосредственно с графеном. Наблюдаемые изменения сопротивления, вероятно, связаны с адсорбированными на поверхности графена молекулами воздуха, которые в различной степени влияют на общее сопротивление композита.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, грант № 075-15-2025-572.

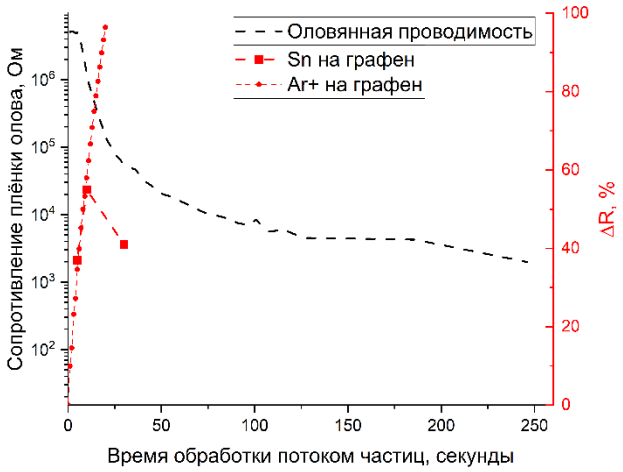


Рис. 2. Зависимость сопротивления образца от времени обработки потоком частиц: левая ось – сопротивление тонкой плёнки металла, правая ось – относительное изменение сопротивление графена после обработки

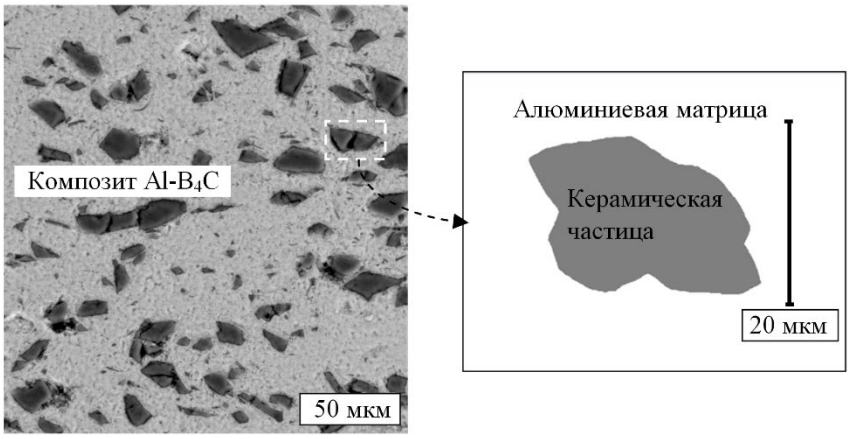
ВЛИЯНИЕ ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ НА ЗАКОНОМЕРНОСТИ ДЕФОРМАЦИОННОГО ПОВЕДЕНИЯ И РАЗРУШЕНИЯ МЕТАЛЛОКЕРАМИЧЕСКИХ КОМПОЗИТОВ

Д.Д. Гатиятуллина[1, 2], А.В. Землянов[1], Р.Р. Балохонов[1, 2]

[1]*Институт физики прочности и материаловедения им. В.Е. Панина СО РАН, Томск*
[2]*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск*
gdiana@ispms.ru

В последние десятилетия металлокерамические композиционные материалы активно заменяют чисто металлические материалы и сплавы в различных отраслях промышленности и производства [1, 2]. Композиты на основе алюминия за счет высокой удельной прочности являются перспективными конструкционными материалами и используются в автомобильной и аэрокосмической промышленности для уменьшения веса транспортного средства и эффективного использования топлива [3-5]. При изготовлении композиционных материалов и покрытий возникают остаточные технологические напряжения, влияние которых на эксплуатационные характеристики изделий недостаточно изучено [5]. Композиционные материалы имеют выраженную структурную неоднородность, обусловленную наличием границ раздела различного масштаба и геометрии, а также различием термомеханических свойств матрицы и частиц. Вблизи криволинейных границ раздела между матрицей и частицами возникают опасные концентрации растягивающих напряжений, которые приводят к зарождению микротрещин и локализации пластической деформации в алюминии [6]. Для построения численных моделей, которые адекватно описывают процессы деформации и разрушения материала с покрытием, необходимо учитывать структуру в явном виде. Использование многоуровневого подхода и разработанных на его основе моделей с явным учетом границ раздела обеспечит получение принципиально новых знаний о механизмах деформации композитов на разных масштабных уровнях. В настоящей работе исследовано влияние остаточных напряжений на макроскопическую прочность композиционного материала «алюминий-карбид бора» методами численного моделирования.

На рисунке 1а представлена характерная микроструктура металлокерамического композита, изготовленного твердофазным спеканием [7]. На основе экспериментальных изображений были созданы модельные структуры композита на различных масштабных уровнях.

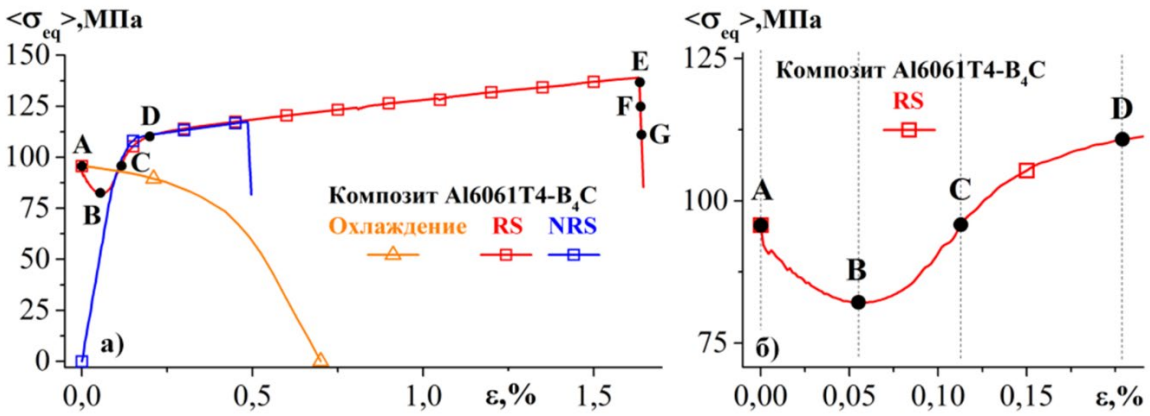


а б

Рис. 1. Металлокерамический композиционный материал:
а) экспериментальное изображение;
б) модельная структура

На рисунке 1б представлена модельная двухфазная структура композита на микроуровне. Механическая реакция алюминия описывается с помощью изотропной упругопластической модели и феноменологического закона упрочнения. Для учета зарождения и распространения трещин в керамических частицах используется энергетический критерий разрушения, учитывающий вид локального напряженного состояния. При моделировании остаточных напряжений используются соотношения Дюамеля-Неймана. Динамические краевые задачи о нагружении композитов решаются численно методом конечных элементов. Определяющие соотношения материалов интегрированы в программный пакет ABAQUS/Explicit с помощью разработанных пользовательских подпрограмм VUMAT.

Механизмы деформации и разрушения композитов на примере единичного включения следующие. Проведены расчеты чисто механического нагружения (растяжение, NRS) и термомеханического нагружения (охлаждение+растяжение, RS) композита с единичной частицей, рисунок 2. По вертикальной оси на кривых течения отложены осредненные по всей расчетной области напряжения, а по горизонтальной оси – относительное удлинение либо сжатие композита в направлении приложенной нагрузки. Для удобства сравнения расчетов растяжения с учетом и без учета предварительного охлаждения, красная и синяя кривая течения начинаются с величины ε = 0%, в действительности остаточная деформация композиционного материала составляет ε = –0,7%.



а б

Рис. 1. Расчетные кривые течения композита с единичной частицей:
а) при охлаждении, с учетом RS и без учета остаточных напряжений NRS;
б) участок кривой течения RS на начальной стадии растяжения

Начало механического нагружения после охлаждения композита сопровождается падением напряжений на кривой течения, рисунок 2б, которое связано с перестройкой напряженного состояния от всестороннего к одноосному. Установлено, остаточные напряжения оказывают положительное влияние на прочность композита. В случае чисто механического растяжения структуры разрушение композита происходит при деформации композита ε = 0,5%, а в случае нагружения после предварительного охлаждения деформация разрушения составляет более ε = 1,5%, рисунок 2а.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема FWRW-2026-0003 и программы ТГУ Приоритет 2030.

Литература

1. M.S.K.K.Y. Nartu, P. Agrawal. Additive Manufacturing of Metal Matrix Composites. Mater. Des., 2025, 252 113609.

2. Z.J. Wang, Z. Zheng, M.W. Fu. Aluminum Matrix Composites: Structural Design and Microstructure Evolution in the Deformation Process. J. Mater. Res. Technol., 2024, 30 3724–3754.
3. X. Wu, W. Zhang. A Review on Aluminum Matrix Composites' Characteristics and Applications for Automotive Sector. Heliyon, 2024, 10(20) e38576.
4. С.В. Гладковский, С.В. Петрова, Р.А. Саврай и др. Влияние состава армирующей фазы на структуру и абразивную износостойкость упрочненных частицами B_4C и SiC алюмоматричных композитов. Физ. мезомех., 2024, 27(3) 102–115.
5. C. Dai, Z. Zhou, J. Ke et al. Research on the Mechanisms of Reinforcing Particles on the Laser Shock Peening Induced Residual Stress in Aluminum-Based Composite Materials. Opt. Lasers Eng., 2024, 180 108298.
6. Р.Р. Балохонов, В.А. Романова, А.В. Землянов и др. Вычислительная мезомеханика материалов на примере аддитивно изготовленного эвтектического алюминиево-кремниевого сплава. Физ. мезомех., 2025, 28(S4) 21–40.
7. Р.Р. Балохонов, А.С. Кульков, А.В. Землянов и др. Эволюция остаточных напряжений и разрушение при термомеханическом нагружении дисперсно-упрочненных металлокерамических композиционных материалов. Физ. мезомех., 2021, 24(5) 5–15.

ПРИМЕНЕНИЕ СУРРОГАТНЫХ МОДЕЛЕЙ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ РЕКУРРЕНТНЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ПРОЦЕССОВ ОБРАБОТКИ МЕТАЛЛОВ ДАВЛЕНИЕМ

П.А. Гладких, А.И. Швейкин

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь
gladkikh.p@yandex.ru

Развитие аэрокосмической отрасли и, в частности, двигателестроения диктует необходимость обеспечения улучшенных эксплуатационных свойств деталей, в первую очередь — их высокой прочности. Поскольку данные свойства определяются параметрами материала и напрямую зависят от состояния его внутренней структуры на различных масштабах — от микро- и мезоуровней (дислокации и зерна) до макроскопического уровня (образцы) — достижение целевых характеристик требует возможности управления именно структурными особенностями изделия.

Для поиска структуры, которая обеспечивала бы наилучшее сочетание эксплуатационных характеристик, применяются многоуровневые конститутивные модели (КМ)[1–3], построенные на физических представлениях о механизмах неупругой деформации, таких как скольжение краевых дислокаций, изменение границ зерен. Основное их преимущество — способность связывать внутренние структурные параметры с откликом материала. Это позволяет не только описывать поведение уже существующих сплавов, но и предсказывать изменение его структуры, что позволяет оценивать влияние микроструктурных параметров на механические свойства и целенаправленно проектировать материалы с заданными характеристиками, что особенно актуально при разработке технологий получения материалов с модифицированной структурой.

Однако у многоуровневого подхода есть существенное ограничение: прямое использование детальных физически обоснованных моделей в оптимизационных расчётах сопряжено с очень высокими вычислительными затратами. При численном моделировании методом конечных элементов в каждой точке интегрирования расчетной сетки и на каждом шаге по времени необходимо решать локальную задачу для представительного объема. Это подразумевает итерационное решение систем нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающих эволюцию внутренних переменных, с последующей процедурой гомогенизации для перехода от мезомасштаба к макроуровню. В результате даже моделирование квазистатического деформирования стандартного лабораторного образца может занимать от нескольких часов до суток машинного времени на вычислительном кластере [4, 5].

Данная особенность становится критической при постановке задач оптимизации структуры материала. Процессы поиска оптимальных параметров микроструктуры по своей природе являются итеративными и требуют многократного (часто тысяч и десятков тысяч раз) прямого моделирования для оценки значения целевой функции или вычисления градиентов. Пространство параметров в таких задачах, как правило, многомерно и не является выпуклым, что исключает использование простых градиентных методов и вынуждает применять алгоритмы глобального поиска, требующие еще большего числа вычислений. Если одно обращение к многоуровневой модели само по себе сопряжено с высокими затратами, то встраивание ее в цикл оптимизации делает задачу вычислительно неразрешимой на существующих аппаратных средствах в приемлемые сроки.

В сложившихся условиях исследователи вынуждены идти на компромиссы. Упрощение физической модели (переход к феноменологическим зависимостям) снижает предсказательную способность и сужает область применимости; кроме того, не формализован подход для осуществления указанного перехода. Оптимизация на уменьшенных представительных объемах не всегда корректно отражает макроскопическое

поведение. Один из путей преодоления ресурсных ограничений — переход к базирующимся на нейронных сетях суррогатным моделям [6, 7], которые позволяют давать математическую аппроксимацию результатов исходных многоуровневых КМ и воспроизводить их отклик при кардинально меньших вычислительных издержках. В настоящей работе для построения такой суррогатной модели используется рекуррентная нейросетевая архитектура Extended Minimum State Cells[8], ориентированная на описание процессов с учетом истории нагружения. Выполнена количественная оценка как точности аппроксимации, обеспечиваемой суррогатной моделью, так и достигаемого ускорения вычислений по сравнению с исходной физически обоснованной многоуровневой конститутивной моделью в ходе численного моделирования процесса прокатки стали AISI 304.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках реализации национального проекта «Наука и университеты» (в рамках выполнения государственного задания в лаборатории многоуровневого моделирования конструкционных и функциональных материалов, проект № FSNM-2024-0002).

Литература

1. П.В. Трусов, А.И. Швейкин. Многоуровневые модели моно- и поликристаллических материалов: теория, алгоритмы, примеры применения. Новосибирск: Издательство СО РАН, 2019. 605 с.
2. S. Keshavarz, C.E. Campbell, A.C. Reid. Multi-scale crystal plasticity model of creep responses in nickel-based superalloys. Materials, 2022, 15(13) 4447.
3. P. Christie, M.A. Siddiq, U.B. Asim, R.M. McMeeking, M.E. Kartal. Crystal plasticity based constitutive model for deformation in metastable β titanium alloys. Model. Simul. Mater. Sci. Eng., 2024, 32(5) 055023.
4. C. Bonatti, B. Berisha, D. Mohr. From CP-FFT to CP-RNN: Recurrent neural network surrogate model of crystal plasticity. Int. J. Plast., 2022, 158 103430.
5. J.S. Weeks, A.P. Stebner. Efficient Multiscale Simulations of Incremental Sheet Forming Using Machine Learning Surrogate Models for Crystal Plasticity. Integr. Mater. Manuf. Innov., 2025, 14(4) 573-592.
6. J. Dornheim, L. Morand, H.J. Nallani, D. Helm. Neural Networks for Constitutive Modeling: From Universal Function Approximators to Advanced Models and the Integration of Physics. Arch. Comput. Methods Eng., 2024, 31(2) 1097-1127.
7. A. Hussain, A.H. Sakhaei, M. Shafiee. Machine learning-based constitutive modelling for material non-linearity: A review. Mech. Adv. Mater. Struct., 2026, 33(1) 2439557.
8. J.N. Heidenreich, D. Mohr. Extended minimal state cells (EMSC): Self-consistent recurrent neural networks for rate- and temperature dependent plasticity. Int. J. Plast., 2025, 188 104305.

СТРУКТУРНАЯ ТЕОРИЯ ДЕФОРМИРОВАНИЯ: ВАРИАЦИОННЫЙ ПОДХОД, УСЛОВИЯ ГЛАДКОСТИ И ИНВАРИАНТНЫЙ БАЗИС ОПЕРАТОРОВ УПРУГОПЛАСТИЧЕСКОГО ОТКЛИКА

Н.Я. Головина

Тюменский индустриальный университет (ТИУ), Тюмень
golovinanj@tyuiu.ru

Развитие механики деформируемого твердого тела в последние десятилетия шло преимущественно по пути построения феноменологических зависимостей, обеспечивающих высокую точность аппроксимации отдельных участков экспериментальных диаграмм деформирования $\sigma = \sigma(\varepsilon)$. Однако такие модели, как правило, не имеют единого структурного «каркаса»: математическая форма описаний выбирается эмпирически, а параметры подбираются по данным без явной связи с внутренними механизмами изменения жесткости и диссипации энергии [1-3]. В результате теряется естественный механизм переноса модели между материалами и режимами нагружения, а также затрудняется автоматизация идентификации структурных свойств по кривым нагружения.

Настоящая работа развивает структурную теорию деформирования, основанную на обратном подходе: внутренняя структура поведения материала должна быть заложена в математический аппарат модели еще до подбора параметров. В качестве носителя такой структуры предлагаются вариационные формулировки, условия гладкости решения в узлах структурной перестройки и инвариантный базис структурных элементов - операторов упругого и пластического отклика.

В основе концепции лежит постулат о том, что свойства материала определяются тем обыкновенным дифференциальным уравнением (ОДУ), решением которого является кривая деформирования $\sigma = \sigma(\varepsilon)$ [4]. Предложена воспроизводимая вычислительная процедура кусочно-линейной аппроксимации диаграммы $\sigma(\varepsilon)$, основанная на фиксации класса гладкости как структурного ограничения. Процедура обеспечивает структурную сегментацию кривой деформирования с контролируемым классом гладкости, что позволяет трактовать гладкость как количественную меру согласованности деформационных процессов: C^0 гарантирует неразрывность напряжений, C^1 - плавность перехода касательного модуля, а C^2 - непрерывность скорости его изменения. Математический порядок ОДУ задает класс гладкости напряжения, а коэффициенты - физические свойства материала в выбранной структуре модели.

В рамках структурной теории упругопластическое поведение предлагается описывать семейством моделей, классифицируемых по классу гладкости: C^0, C^1, C^2. Тем самым реализуется структурная классификация моделей не по их феноменологической форме, а по математическому свойству определяющих соотношений - порядку и коэффициентам определяющего ОДУ. Дифференциальное уравнение модели материала трактуется как уравнение Эйлера некоторого вариационного принципа. Вариационный оператор несет информацию о допустимых механизмах отклика: его дифференциальный порядок и структура коэффициентов связаны с особенностями переходов в диаграмме деформирования. Таким образом, вариационно-операторный подход обеспечивает связь между наблюдаемой формой диаграммы, математическими свойствами решения и физической интерпретацией коэффициентов.

Отличие предлагаемого подхода от традиционного вариационного моделирования заключается в том, что вариационная постановка строится не после выбора эмпирической формулы, а вместе со структурной классификацией по классу гладкости. В результате модель рассматривается как вариационное представление минимального/стационарного действия для решения, определяемого в соответствии с выбранным операторным классом. В структурной постановке фундаментальные решения определяются как решения

минимального порядка, соответствующего выбранному классу гладкости. Показано, что линейный обратимый закон Гука представляется как решение ОДУ второго порядка; обобщенная модель Рамберга-Осгуда соответствует дифференциальному уравнению четвертого порядка; модель UGent соответствует дифференциальному уравнению шестого порядка. Более сложные модели строятся через комбинации и обобщения фундаментальных операторных блоков. Тем самым достигается иерархичность моделей: более высокие классы гладкости формируют расширенные структуры ОДУ и соответствующие вариационные формы, способные описывать сложные диаграммы (упрочнение/разупрочнение, множественные стадии пластического течения, точки перегиба).

Установлено, что при переходе от класса C^0 к C^1 и C^2 изменяется структура вариационных форм и характер согласования сегментов диаграммы. При повышении класса гладкости появляются дополнительные структурные степени свободы, которые интерпретируются как дополнительные каналы диссипации и/или новые билинейные компоненты плотности функционала. Для класса C^2 показано появление двух новых взаимосвязанных подсистем (каналов) диссипации и двух новых билинейных компонент плотности функционала, что приводит к формированию ОДУ шестого порядка. В практическом плане это означает: геометрически похожие экспериментальные диаграммы могут требовать моделей разного класса гладкости, и это требование отражает не просто точность аппроксимации, а физически содержательную глубину перестройки структуры деформирования.

Предложены алгоритмы машинного распознавания материалов и структурной сегментации диаграмм на основе метода среднеквадратичного отклонения, условий Каруша-Куна-Таккера (ККТ), сглаживающих сплайнов Рейнша и шестисегментного шаблона для распознавания по критерию контактных координат сегментов. В автоматическом режиме выделяются стадии деформирования и выбирается класс гладкости, согласованный с требуемым операторным порядком. Применение разработанных алгоритмов к анализу экспериментальных данных, полученных при исследовании гибких металлических трубопроводов и сильфонных компенсаторов [5, 6], позволило установить, что в условиях циклического нагружения указанных элементов наблюдается последовательный переход класса гладкости модели от C^1 к C^2 по мере накопления пластических деформаций. Это свидетельствует о структурной перестройке механизмов деформирования и подтверждает необходимость учета класса гладкости при расчете ресурса таких конструкций.

Литература

1. Н.Я. Головина, П.А. Белов. Анализ эмпирических моделей кривых деформирования упругопластических материалов (обзор). Часть 1. Математическое моделирование и численные методы, 2022, № 1 (33) 63-96. DOI: 10.18698/2309-3684-2022-1-6396.
2. Н.Я. Головина, П.А. Белов. Анализ эмпирических моделей кривых деформирования упругопластических материалов (обзор). Часть 2. Математическое моделирование и численные методы, 2022, № 2 (34) 14-27. DOI: 10.18698/2309-3684-2022-2-1427.
3. Н.Я. Головина. Анализ эмпирических моделей кривых деформирования упругопластических материалов (обзор). Часть 3. Математическое моделирование и численные методы, 2023, № 1 (37) 3-31. DOI: 10.18698/2309-3684-2023-1-331.
4. N. Golovina. Modeling the Stress-Strain Curve of Elastic-Plastic Materials. Solid State Phenomena, 2021, 316, 936-941. DOI: 10.4028/www.scientific.net/SSP.316.936.
5. С.Я. Кривошеева, Н.Я. Головина. Исследование влияния осевой жесткости на работу гибких металлических трубопроводов. Научное обозрение, 2016, № 16, 213-216.
6. N.Y. Golovina, S.Y. Krivosheeva. Research in area of longevity of sylphon Scraies. IOP Conference Series: Earth and Environmental Science, 2018, 012043.

СВЕРХПЛАСТИЧЕСКАЯ ФОРМОВКА ЛИСТОВОЙ ЗАГОТОВКИ ИЗ УПРОЧНЯЮЩЕГОСЯ МАТЕРИАЛА В КЛИНОВИДНУЮ МАТРИЦУ С РАЗЛИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ КОНТАКТА

А.В. Гордиенко, Т.А. Белякова

Механико-математический факультет Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова, Москва
aleksandr.gordienko@math.msu.ru

Одним из главных практических применений сверхпластичности является сверхпластическая формовка (СПФ) оболочек давлением газа. СПФ оболочек позволяет создавать бездефектные изделия больших размеров и сложной формы при низких напряжениях течения [1]. Важной задачей является определение толщины изделий, а также оценка времени, затрачиваемого на формовку, при этом условия контакта между оболочкой и штампом суще-ственно влияют на конечное распределение толщины. Поэтому интерес представляет созда-ние математических моделей СПФ оболочек с различными условиями контакта.

Решена задача о СПФ листовых заготовок из несжимаемого упрочняющегося материала в протяженную клиновидную матрицу с учётом проскальзывания (рис. 1). В качестве модели контакта рассматривались кулоновское трение, трение с прилипанием и идеальное скольжение.

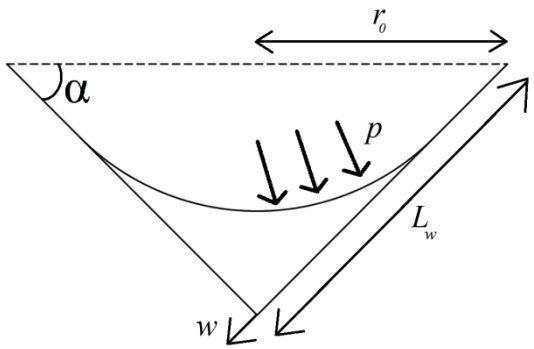


Рис. 1. Схема формовки.

Форма матрицы определяется углом α между сторонами и основанием сечения матрицы, а также длиной стороны L_w. w – координата вдоль стороны клина; p – давление, которое является заданной функцией времени.

Делались следующие предположения: (I) материал оболочки изотропный и несжимаемый; (II) температура постоянна; (III) упругими деформациями можно пренебречь; (IV) скорости деформаций малы, так что процесс формовки квазистатический [2-6]; (V) толщина оболочки намного меньше радиуса кривизны, поэтому для описания частей оболочки, которые не контактируют с матрицей, можно использовать мембранную теорию оболочек [2-6]; (VI) выполнены условия плоской деформации; (VII) в области контакта напряженное состояние является двухосным, и напряжения параллельны срединной плоскости оболочки.

Из предположения (VI) следует постоянство радиуса кривизны частей оболочки, которые свободно деформируются, не касаясь штампа [7]. Если толщина в свободно деформирующейся части оболочки постоянна в начальный момент времени, то она остается постоянной в последующие моменты времени [3].

В качестве определяющих соотношений использовались предположение о пропорциональности девиаторов тензора напряжений и тензора скоростей деформаций

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \frac{3\xi_e(\sigma_e, \varepsilon_e)S_{ij}}{2\sigma_e}$$

и закон ползучести с учетом упрочнения в виде

$$\sigma_e = K\xi_e^m \varepsilon_e^n,$$

где $\sigma_e = \sqrt{3S_{ij}S_{ij}/2}$ - интенсивность напряжений; $\varepsilon_e = \sqrt{2\varepsilon_{ij}\varepsilon_{ij}/3}$ – интенсивность деформаций; $\xi_e = \sqrt{2\dot{\varepsilon}_{ij}\dot{\varepsilon}_{ij}/3}$ - интенсивность скоростей деформаций; $\dot{\varepsilon}_{ij}$ - тензор скоростей деформаций, вследствие несжимаемости, совпадающий со своим девиатором; S_{ij} - девиатор тензора напряжений.

Условие несжимаемости записывается в виде

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\left(\int_0^w h(t,\nu)\,\mathrm{d}\nu + R\varphi h(t,w)\right) = 0,$$

где w – длина области контакта; $h(t,w)$ – толщина оболочки; R – радиус дуги, на которой лежит свободно деформирующаяся часть оболочки; φ - угол дуги свободно деформирующейся части оболочки.

Приведённая постановка задачи позволяет найти толщину оболочки $h(t,w)$, например, в случаях кулоновского трения, трения с прилипанием и идеального скольжения.

На рис. 2-4 показаны графики решений при разных моделях контакта, а также результаты конечно-элементного моделирования в ANSYS.

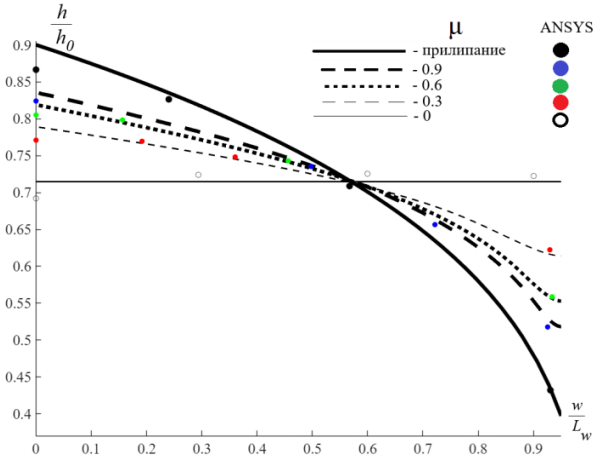


Рис. 2. Графики профиля толщины при разных моделях контакта.

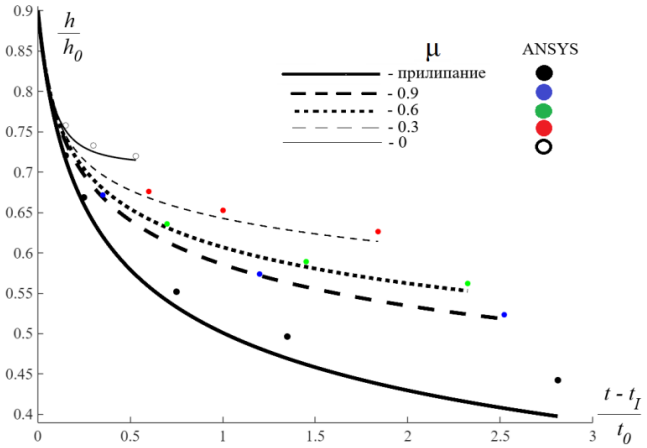


Рис. 3. Графики зависимости толщины в свободно деформирующихся частях оболочки от времени при разных моделях контакта.

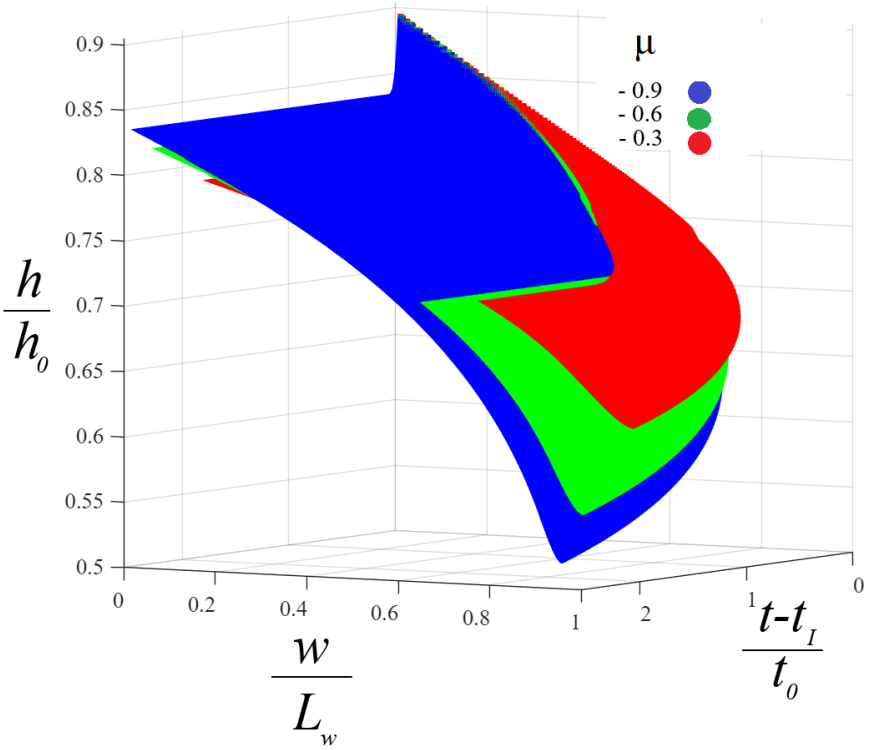


Рис. 4. Зависимость толщины от времени и длины зоны контакта при разных значениях μ.

Таким образом, решена задача о СПФ листовой заготовки в клиновидную матрицу с учетом трения. Были рассмотрены различные модели контакта, в том числе кулоновское трение. Решение хорошо совпадает с конечно-элементным моделированием в ANSYS с константами материала, взятыми из работы [8]. Учёт проскальзывания значительно меняет решение по сравнению с моделями контакта с прилипанием и контакта с идеальным скольжением. Проведено сравнение решений для случая с упрочнением и случая без упрочнения для разных форм матрицы.

Литература

1. K.A. Padmanabhan, R.A. Vasin, F.U. Enikeev. Superplastic Flow: Phenomenology and Mechanics. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2001. 363 p.
2. D.L. Holt. An analysis of the bulging of a superplastic sheet by lateral pressure. Int. J. Mech. Sci., 1970, 12(6) 491–497.
3. R.A. Vasin, F.U. Enikeev, R.V. Safiullin. Mathematical Modeling of Superplastic Forming of a Long Rectangular Box Section. Mater. Sci. Forum., 1999, 304-306 765-771.
4. R.A. Vasin, F.U. Enikeev, M. Tokuda, R.V. Safiullin. Mathematical modelling of the superplastic forming of a long rectangular sheet. Int. Journal of Non-Linear Mech., 2003, 38(5) 799–807.
5. G.R. Murzina, A.R. Zharmukhametova, V.R. Ganieva, F.U. Enikeev. Method for calculating the parameters of superplasticity of titanium alloys based on the results of test forming into a rectangular matrix at constant pressure. Bull. South Ural State Univ., 2023. 16(1) 96-107.
6. A.V. Gordienko, T.A. Beliakova. Superplastic pressure forming of a metal sheet into a long die with an isosceles trapezoid cross section. Lett. Mater., 2025, 15(3) 184-191.
7. Н.Н. Малинин. Ползучесть в обработке металлов. М.: Машиностроение, 1986. 222 с.
8. G. Giuliano. Constitutive equation for superplastic Ti–6Al–4V alloy. Materials & Design., 2008, 29(7) 1330–1333.

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА УСЛОВИЙ МОДИФИКАЦИИ ПОВЕРХНОСТИ МНОГОСЛОЙНЫХ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ПОКРЫТИЙ НА ОСНОВЕ НИТРИДОВ ГАФНИЯ И ТИТАНА ПОТОКОМ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ИОНОВ

О.Р. Гребенщиков, М.М. Гребенщикова, А.В. Герасимов

Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань
grebenschikova.marina@yandex.ru

Вопрос о глубине модификации материалов под действием потоков низкоэнергетических ионов (ПНЭИ) остается дискуссионным, особенно при сравнении объектов с различной электропроводностью и морфологией. Анализ литературных источников [1-3], а также собственные исследования авторов [4, 5], показывают, что в том случае, когда потоком низкоэнергетических ионов (ПНЭИ) проводится модификация материалов на полимерной, органической основе, как природного, так и синтетического происхождения, за счет наличия пористой структуры происходит частичный пробой поверхностного слоя полимера и в результате обработка проводится в объеме, а не сугубо на поверхности образца. Т.е. модификации подвергаются и внутренние объемы органического материала. В случае же воздействия ПНЭИ на многослойный нанокомпозит на основе металлического сплава, например, ВТ-6, ВТ1-0, с гафниево-титановыми нитридными покрытиями, которые, несмотря на наличие некоторой пористости в структуре поверхности, имеют высокую электропроводность, близкую к электропроводности металлов, гипотеза частичных пробоев в отношении них не может считаться справедливой.

Однако, необходимо отметить, что в случае высокочастотной емкостной обработки, механизм взаимодействия ПНЭИ с объемно-пористыми полимерными материалами и с нанокомпозиционными материалами, един, и на поверхности модифицируемых образцов ионы потока плазмы вступают во взаимодействие с атомами поверхностного слоя объекта. Физический механизм взаимодействия заключается в обмене частиц энергиями и зарядами, а химическое взаимодействие незначительно при условии низких энергий и интенсивности потока.

Таким образом, поскольку рассматриваемая модификация идет в условиях воздействия низкоэнергетических ионов, определяющим является не химическое превращение материала, так как при таких энергиях и интенсивностях химическая составляющая взаимодействия незначительна, и поэтому основной вклад дают обмен энергией и зарядом между ионами плазмы и атомами поверхностного слоя.

Взаимодействие потока активных частиц плазмы и объектов, преимущественно состоящих из легких химических элементов (любые органические объекты), приводит к распылению атомов, фрагментов молекул. Металлы же, – титан и гафний, используемые в электродуговых испарителях, а также вольфрам, молибден, входящие в состав титановых сплавов, подвержены распылению незначительно. Изменения в фазовом составе и структуре под действием ПНЭИ на поверхностный слой образца также рассматриваться не будут. Механизм высвобождения нанокристаллитов нитрида гафния связан не с разрушением ковалентных и ионных связей кристалла нитрида, а в создании условий, облегчающих отделение и выход кластерных структур нитридов в виде нанокристаллитов с поверхности структурных элементов нитридного покрытия.

Литература

1. И.П. Ершов, Л.А. Зенитова, А.Н. Даутова, Ф.Р. Сагитова. Влияние плазмы высокочастотного индукционного разряда на стекловолокно, оцененное с помощью рентгеновской компьютерной томографии. Изв. Волг.ГТУ, 2023, 5(276) 125-132.

2. Э.Ф. Вознесенский, Ю.А. Тимошина, И.С. Мифтахов [и др.]. Применение функциональных порошков и плазменных методов для модификации текстильных материалов. Наноиндустр., 2021, 14(S6) 385-392.
3. М.М. Харьков, А.В. Казиев, А.В. Тумаркин [и др.]. Модификация поверхности титана потоками ионов из плазмы ВЧИ разряда. Физ. низкотемп. пл. К.: Отечество, 2017, 190.
4. M.M. Mironov, M.M. Grebenshchikova. Structure and properties of nitrides on the surface of collagen. Journ.of Phys.: C.S., 2017, 789(1) 012035.
5. М.М. Гребенщикова. Получение биомедицинских материалов с биосовместимыми и биостойкими свойствами на основе многослойных покрытий. Титан, 2024, 2(82) 37-40.

ВЛИЯНИЕ ЛЕГИРУЮЩИХ ПРИМЕСЕЙ АЗОТА И БОРА НА СТРУКТУРНЫЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ АВ-ДИАМАНОВ

А.А. Грекова, Гришаков К.С., М.М. Маслов

Национальный Исследовательский Ядерный Университет «МИФИ», Москва
ingo.tyan2@mail.ru

Диаман (C_2H, C_2F) является квазидвумерным аналогом объемного алмаза [1]. Формирование его кристаллической решетки происходит в процессе осаждения химически активных атомов водорода или фтора на внешние стороны биграфена. Подобная структурная модификация позволяет трансформировать традиционное для двухслойного графена ван-дер-ваальсовое межслоевое взаимодействие в ковалентные связи. Для диамана характерны несколько типов кристаллической решетки, среди которых наиболее энергетически выгодными являются AA и AB, структурно аналогичные алмазу и лонсдейлиту соответственно [2]. На электронные свойства диамана оказывают существенное влияние два фактора: тип пассивирующих атомов (водород или фтор), а также природа и концентрация легирующей примеси. Например, AB-диаман, при пассивации водородом обладает диэлектрической щелью E_g~3 эВ [3], тогда как при фторировании E_g ~4 эВ [4]. В свою очередь, наиболее подходящие для легирования атомы, такие как азот и бор, приводят к образованию примесных энергетических уровней в запрещенной зоне диамана, снижая ее эффективное значение [3, 5]. Особое внимание заслуживает тот факт, что введение бора с концентрацией, примерно, 16% и 33% в лонсдейлитовую кристаллическую решетку диамана приводит к возникновению сверхпроводящего состояния при температуре менее 53 К [6]. Однако влияние относительно низких концентраций примесных атомов азота и бора на физические свойства диаманов изучено недостаточно. В связи с этим цель настоящей работы – определить, как легирование этими элементами (при концентрации 2%) влияет на структурные и электронные характеристики AB-диаманов.

В настоящей работе структурные и электронные характеристики AB-диаманов, легированных атомами бора и азота, исследовались в рамках теории функционала плотности с применением пакета программ Quantum Espresso [7]. Структурная оптимизация исследуемых материалов выполнялась с использованием обменно-корреляционного функционала Пердью-Ванга (PW) [8] и базисом плоских волн. Расчет электронных характеристик, включающих в себя зонную структуру и плотность электронных состояний, оптимизированных структур рассчитывались в приближении локальной плотности (LDA) при использовании обменно-корреляционного функционала Пердью-Ванга (PW) [8] с базисом плоских волн. Базисный набор плоских волн для разложения волновых функций и электронной плотности был ограничен энергиями отсечки 140 Ry и 640 Ry соответственно. В обратном пространстве использовалась сетка из $6 \times 6 \times 1$ k-точек, построенная по методу Монкхорста-Пака [9]. Структурная оптимизация продолжалась до тех пор, пока компоненты всех сил, действующих на атомы, не становились менее 10^{-5} H/Bohr. В направлении, перпендикулярном плоскости расположения исследуемых диаманов, использовался «вакуум» размером 17 Å, для устранения нефизических взаимодействий между образами структуры из-за периодических граничных условий.

В настоящем исследовании рассматривались неэквивалентные кристаллические конфигурации, соответствующие внедрению двух атомов бора или азота (в концентрации 2%) в структуру AB-диамана. Расчеты проводились на 3×3 диамановой суперъячейке, содержащей 64 атома углерода и 32 атома водорода. Из всех возможных неэквивалентных положений примесных атомов были отобраны варианты, отвечающие минимуму полной энергии по результатам геометрической оптимизации. В вышеуказанных структурах атомы бора и азота образуют связи с водородом, что, как показано ниже, оказывает влияние на электронные характеристики AB-диаманов.

В результате проведения геометрической оптимизации определены значения постоянных решетки l_0 для рассматриваемой суперъячейки АВ диамана: идеальная структура l_0 = 9.975 Å; диаман, легированный двумя атомами бора l_0 = 9.975 Å (рис. 1a), l_0 =9.954 Å (рис. 1b); диаман, легированный двумя атомами азота l_0 = 10.019 Å (рис. 1c). Анализ полученных данных показывает, что внедрение двух атомов бора или азота приводит к несущественному искажению кристаллической решетки АВ-диамана и к уменьшению ее постоянной решетки, в среднем, на 0.17%.

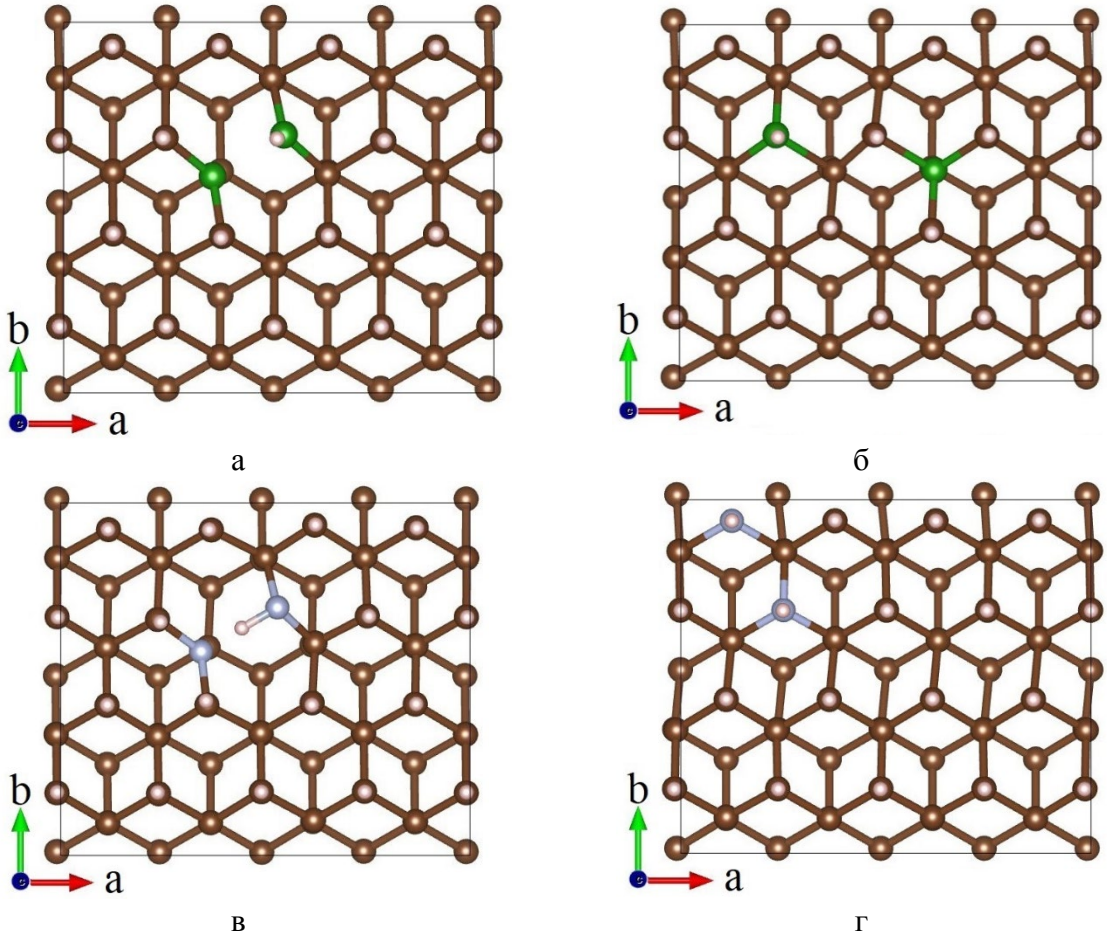


Рис. 1. Неэквивалентные положения атомов азота и бора в кристаллической решетке АВ-диамана. Коричневые атомы – углерод, розовые атомы – водород, зеленые атомы – бор, серые атомы – азот.

Анализ электронных свойств исследуемых систем показал, что идеальный АВ-диаман с гидрированными внешними поверхностями является широкозонным полупроводником с шириной запрещенной зоны E_g = 3.04 эВ. Замещение двух атомов углерода бором (рис. 1a) приводит к сужению эффективной диэлектрической щели до 1.41 эВ. Напротив, внедрение двух атомов азота (рис. 1c) расширяет запрещенную зону до 3.13 эВ.

Установлено, что легирование кристаллической решетки АВ-диамана азотом или бором вызывает ее сжатие, параметр решетки уменьшается в среднем на 0.17%. Несмотря на столь незначительное геометрическое искажение $\Delta l_0 < 1\%$, электронная структура претерпевает существенные изменения. В запрещенной зоне диамана формируются примесные уровни: акцепторные – вблизи потолка валентной зоны (при легировании бором), и донорные – вблизи дна зоны проводимости (при легировании азотом). Именно появление этих состояний обуславливает сильную модуляцию эффективной величины запрещенной зоны. Полученные результаты открывают новые возможности для направленного конструирования элементов наноэлектроники на основе двумерных углеродных материалов.

Литература

1. L.A. Chernozatonskii, P.B. Sorokin, A.G. Kvashnin, D.G. Kvashnin. Diamond-like C_2H nanolayer, diamane: Simulation of the structure and properties. JETP. Lett., 2018, 90 134-138.
2. B. Liu, E. Emmanuel, T. Liang, B. Wang. Advancements in theoretical and experimental investigations on diamanes materials. Nanoscale, 2023, 15 10498-10512.
3. A.A. Grekova, K.S. Grishakov, K.P. Katin, M.M. Maslov. Influence of Substitutional Doping by Boron and Nitrogen Atoms on Electronic and Optical Characteristics of Diamanes. J. Struct. Chem., 2025, 66 230-239.
4. R. Kevorkyants, D.S. Shtarev. Chemically functionalized diamanes – A new class of hybrid 2D materials: DFT insight into crystal, mechanical, and electronic properties. J. Phys. Chem. Solids, 2025, 196 112395.
5. A.A. Grekova, K.S. Grishakov, K.P. Katin, V.A. Kurakin, M.M. Maslov. Influence of substitutional doping with boron, nitrogen and iron atoms on structural, electronic and optical properties of diamanes. Lett. Mater., 2026, 16(1) 37-42.
6. H. Qiao, Q. Li, F. Li., S. Ding, X. Qu, G. Yang. Asymmetric Boron Substitution Favoring Superconductivity in Diamondene. J. Phys. Chem. C., 2025, 129(9) 4689-4694.
7. P. Giannozzi, O. Andreussi, T. Brumme, O. Bunau, M. B. Nardelli, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, M. Cococcioni, N. Colonna, I. Carnimeo, A.d. Corso, S. de Gironcoli, P. Delugas, R.A. DiStasio Jr, A. Ferretti, A. Floris, G. Fratesi, G. Fugallo, R. Gebauer, U. Gerstmann, F. Giustino, T. Groni, J. Jia, M. Kawamura, H-Y Ko, A. Kokalj, E. Kucukbenli, M. Lazzeri, M. Marsili, N. Marzari, F. Mauri, N.L. Nguyen, H-V Nguyen, A. Otero-de-la-Roza, L. Paulatto, S. Ponce, D. Rocca, R. Sabatini, B. Santra, M. Schlipf, A.P. Seitsonen, A. Smogunov, I. Timrov, T. Thonhauser, P. Umari, N. Vast, X. Wu, S. Baroni. Advanced capabilities for materials modelling with QUANTUM ESPRESSO. J. Phys.: Condens. Matter., 2017, 29 465901.
8. J.P. Perdew, Y. Wang. Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy. Phys. Rev. B., 1992, 45 13244–13249.
9. H.J. Monkhorst, J.D. Pack. Special points for Brillouin-zone integrations. Phys. Rev. B., 1976, 13 5188– 5192.

СПОСОБ СИНТЕЗА НАНОЧАСТИЦ МЕДИ, КАК ОПРЕДЕЛЯЮЩИЙ ФАКТОР НАСЫЩЕНИЯ ЦЕОЛИТОВ

В.В. Грушина[1], И.Ю. Исаева[2], Г.Ю.Остаева[2]

[1]ООО Компонент-рекатив, Москва
[2]Московский автомобильно-дорожный государственный технический университет (МАДИ), Москва
varya_79@mail.ru

Цеолиты являются перспективной подложкой для размещения частиц золя, позволяющей получить эффективные катализаторы для различных гетерогенных процессов.

В работе изучено влияние условий синтеза золя меди (кислотный и щелочной) на эффективность насыщения цеолитов HY mmm и HZSM-5 mmm, предоставленные ИНК УФИЦ РАН, модернизированные по методике, описанной в работе автора Травкиной [1].

Кислотный способ получения золя меди: восстановление меди из растворов ее солей в присутствии поливинилпирролидона третбутиламинобораном (pH=2-4). Щелочной способ получения золя меди основан на восстановлении меди из ее аммиачного комплекса в присутствии ПВП с помощью глюкозы (pH=10).

Насыщение цеолитов осуществлялось путем их пропитки полученными золями с последующей активацией композита в три итерации. Предварительно активированные цеолиты (прокаленные при 450^{o}C в течение 4 часов - режим активации цеолита) погружали в золь, полученный по способу 1 или 2, выдерживали до прекращения выделения пузырьков воздуха, после чего осторожно промывали дистиллированной водой, просушивали на водяной бане досуха, а затем прокаливали при режиме активации (составляет один цикл насыщения цеолита золем).

Исследование кислотного способа восстановления наночастиц меди методом ПЭМ выявило наноразмерный диапазон частиц, равномерное распределение их на поверхности мезопоры и не значительное количество агломератов в составе полученных композитов. В тоже время исследование образцов полученных щелочным способом. Спектры РФА фиксируют присутствие Cu^{o} и оксида меди (II) в независимости от способа синтеза золя меди.

В результате, получены устойчивые к механическим воздействиям и агрегации частицы средний размер которых составляет менее 50 нм.

Синтез по кислотному механизму золя меди позволяет получить частицы, которые успешно координируются на кислотных центрах кристаллических решёток выбранных цеолитов. Щелочной метод синтеза, напротив, приводит к формированию наночастиц меди для которых процесс агрегации превалирует над процессом адсорбции на поверхность мезопоры.

В перспективе предполагается использовать результаты данного исследования для получения биметаллических частиц на цеолитной подложке, применимых в качестве каталитических систем.

Литература

1. О.С. Травкина. Гранулированные цеолиты a, x, y, морденит и zsm-5 высокой степени кристалличности с иерархической пористой структурой: синтез, свойства и применение в адсорбции и катализе. Автореферат., 2023.

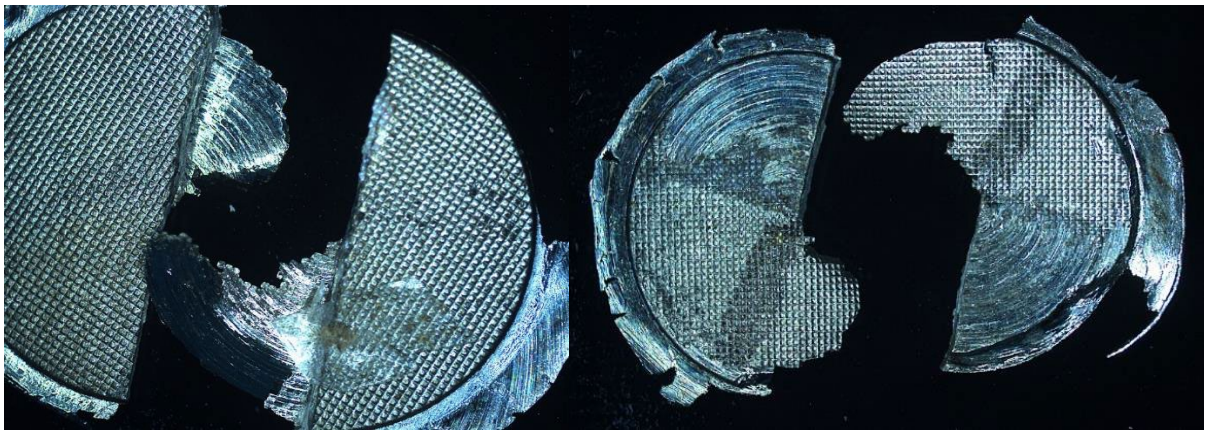
ЛОКАЛИЗАЦИЯ ДЕФОРМАЦИИ - ПРИЧИНА НЕ РЕАЛИЗАЦИИ ДЕФОРМАЦИИ В ОБЪЁМЕ ОБРАЗЦА ПРИ КВД

Д.В. Гундеров[1, 2], Kaveh Edalati[3], Р.Н. Асфандияров[1, 2], С.Н. Сергеев[2], П.О. Кадиров[4], А.В. Шарафутдинов[2], Р.З. Валиев[2]

[1]Институт физики молекул и кристаллов Уфимского федерального исследовательского центра

[2]Уфимский университет науки и -технологий,
[3]WPI, International Institute for Carbon-Neutral Energy Research (Japan
[4]Университет науки и технологий МИСИС
dimagun@mail.ru

Кручение под высоким давлением (КВД) — эффективный метод измельчения структуры металлических материалов до нанокристаллического состояния [1]. Однако ряд исследований показал, что фактическая деформация сдвига, достигаемая при КВД для многих металлов и сплавов, значительно ниже ожидаемой [2,3]. Предполагалось, что это расхождение вызвано эффектом проскальзывания [2,3]. Для анализа накопления деформации при КВД в данной работе был использован метод совместного КВД двух полудисков [2]. Обработка методом КВД проводилась проф. Kaveh Edalati в Kyushu University, Япония. Исследования показали, что в образцах биоразлагаемого сплава Fe–30Mn–5Si (мас., %) (с прочность $\sigma_в \approx 800$ МПа) [4], и высокопрочного объёмного металлического стекла (ОМС) $Zr_{62}Cu_{22}Al_{10}Fe_5Dy_1$ ($\sigma_в \approx 1600$ МПа) сдвиговая деформация в объёме образца после КВД была минимальной. На рис. 1 представлены фото половинок диска сплава FeMnSi после совместного КВД с n = 0,25. Сдвиг линий нанесённых краской на поверхностях дисков свидетельствовало об отсутствии проскальзывания. Однако деформация локализована в приповерхностной зоне образцов, прилегающих к наковальням - полудиски имели «язычки» (слои толщиной 50 мкм и длиной до 5 мм), а также участки на поверхностях, от которых этот слой отделился (рис. 1). В этих областях не наблюдается отпечатка рельефа наковальни. Края половин в объёме не сместились относительно друг друга. Соответственно, в объёме образцов деформация сдвигом при КВД не произошла а фактическая деформация значительно ниже ожидаемой.



Сторона 1 Сторона 2

Рис. 1. Фото половин сплава FeMnSi, после совместного КВД с n=0,25

В меди при КВД с n=0,25 локализация деформации не была зафиксирована. Отсюда явление локализации деформации при КВД определяется свойствами материала. Отметим так же, что хотя фактическая сдвиговая деформация, достигнутая в объёме многих

материалов, была значительно ниже теоретически ожидаемой, в этих металлах и сплавах в процессе КВД тем не менее формировалось наноструктурированное состояние [3,4].

В работе [5] на основе полученных результатов были проанализированы возможные режимы КВД. Моделирование показало, что при некоторых параметрах КВД и механических свойствах материала деформация при КВД локализуется некоторой выделенной плоскости сдвига [5].

Литература

1. A.P. Zhilyaev T.G. Langdon, Using high-pressure torsion for metal processing: fundamentals and applications, Prog. Mater Sci. 53 (2008) 893–979.
2. N. Adachi, Y. Todaka, Y. Yokoyama, M. Umemoto, Cause of hardening and softening in the bulk glassy alloy Zr50Cu40Al10 after HPT Mater. Sci. Eng. A, 627, 171–181 (2015)
3. D.V. Gunderov, R.N. Asfandiyarov, V.V. Astanin, A.V. Sharafutdinov, Slippage during HPT, Accumulative HPT—Overview of the Latest ResultsMetals, 13, (2023)
4. P. Kadirov, Y. Zhukova, D. Gunderov, M. Antipina, T. Teplyakova, N. Tabachkova, A. Baranova, S. Gunderova, Y. Pustov, S. Prokoshkin, Effect of accumulative high-pressure torsion on structure and electrochemical behavior of biodegradable Fe-30Mn-5Si (wt. %) alloy Crystals, 15(4), 351 (2025)
5. Roman Kulagin, Yan Beygelzimer, Yulia Ivanisenko, Andrej Mazilkin Horst Hahn, Modelling of High Pressure Torsion using FEM Procedia Engineering Volume 207, 2017, Pages 1445-1450

МИКРОСТРУКТУРА, ФАЗОВЫЙ СОСТАВ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МНОГОКОМПОНЕНТНОГО СПЛАВА $Fe_{50}Mn_{30}Co_{10}Cr_{10}$, ЛЕГИРОВАННОГО АЗОТОМ И БОРОМ

Д.Ю. Гуртова, Е.Г. Астафурова

Институт физики прочности и материаловедения им. В.Е. Панина Сибирского отделения Российской академии наук, Томск
dasha_gurtova@mail.ru

В отличие от традиционных систем, многокомпонентные сплавы, в частности, эквиатомный сплав Кантора $Fe_{20}Mn_{20}Co_{20}Cr_{20}Ni_{20}$, сочетают высокую коррозионную стойкость с вязким разрушением вплоть до криогенных температур, однако обладают низким пределом текучести, что ограничивает их применение в качестве конструкционного материала [1]. В этой связи разработаны многокомпонентные сплавы второго поколения, например, сплав $Fe_{50}Mn_{30}Co_{10}Cr_{10}$, в котором за счет пониженной энергии дефекта упаковки реализуются TWIP (TWinning-Induced Plasticity – пластичность, наведенная двойникованием) и TRIP (TRansformation-Induced Plasticity – пластичность, наведенная превращением) механизмы, обеспечивающие оптимальный баланс прочности и пластичности [2]. Дополнительное повышение прочности также может быть достигнуто за счет твердорастворного упрочнения элементами внедрения – азотом и бором, и посредством зернограничного упрочнения [3, 4]. При этом азот, растворяясь в кристаллической решетке, способен изменять энергию дефекта упаковки сплава и влиять на формирование химического ближнего порядка, что отражается на стабильности фаз и прохождении TWIP и TRIP механизмов [5]. Бор, в свою очередь, склонный к сегрегации на границах зерен, изменяет их энергетическое состояние и кинетику процессов рекристаллизации, влияя на характер зернограничного упрочнения, описываемого соотношением Холла-Петча [6]. В связи с этим, совместное легирование азотом и бором представляет интерес для исследования ввиду их различного влияния на структуру и механические свойства данной системы.

В настоящей работе проведено исследование влияния легирования азотом и/или бором на микроструктуру, фазовый состав и механические свойства сплава $Fe_{50}Mn_{30}Co_{10}Cr_{10}$. В качестве объектов исследования были выбраны сплавы системы $(Fe_{50}Mn_{30}Co_{10}Cr_{10})_{99-x}N_1B_y$: $Fe_{50}Mn_{30}Co_{10}Cr_{10}$ (МКС), $(Fe_{50}Mn_{30}Co_{10}Cr_{10})_{99}N_1$ (МКС-А), $(Fe_{50}Mn_{30}Co_{10}Cr_{10})_{98,9}N_1B_{0,1}$ (МКС-АБ01), $(Fe_{50}Mn_{30}Co_{10}Cr_{10})_{98,8}N_1B_{0,2}$ (МКС-АБ02), $(Fe_{50}Mn_{30}Co_{10}Cr_{10})_{98,5}N_1B_{0,5}$ (МКС-АБ05) (ат. %). Литые заготовки подвергали отжигу при температуре 1200 ℃ в течение 2 ч с последующей закалкой в воду. Затем проводили горячую прокатку заготовок при 500 ℃ и холодную прокатку с суммарной степенью обжатия 80 %. Для получения разного размера зерна прокатанные заготовки подвергали финальному отжигу при температурах 1050, 1100, 1150 и 1200 ℃ в течение 1 ч.

Показано, что в литом состоянии исследуемые сплавы характеризуются крупнокристаллической дендритной структурой. В базовом сплаве $Fe_{50}Mn_{30}Co_{10}Cr_{10}$ вследствие низкой энергии дефекта упаковки реализуется ГЦК→ГПУ превращение, и доля мартенсита, сформированного при комнатной температуре, достигает ≈ 60 %. Легирование бором и азотом подавляет мартенситный переход, стабилизируя ГЦК-фазу, при этом микроликвация Fe и Mn вызывает лишь незначительные различия параметров кристаллической решетки в дендритных и междендритных областях.

Термомеханическая обработка приводит к росту зерна в базовом МКС сплаве от 37 мкм до 151 мкм при увеличении температуры финального отжига от 1000 до 1200 ℃, с сохранением двухфазного ГЦК+ГПУ состояния. Введение 1 ат. % азота подавляет рост зерна: при тех же режимах ТМО средний размер зерна составляет 26 – 120 мкм, при этом материал приобретает однофазное состояние. В борсодержащем сплаве МКС-АБ05 при

выбранных режимах размер зерна занимает промежуточное положение между значениями в базовом и азотосодержащем сплавах и составляет 42 – 114 мкм; вторичных фаз (боридов, нитридов) в сплавах не обнаружено.

Одноосное растяжение при комнатной температуре показало, что легирование азотом и бором повышает прочностные свойства сплава МКС ($\sigma_{0,2}^{МКС} = 160$ МПа) за счет твердорастворного упрочнения при сопоставимом размере зерна (≈ 110 мкм): максимальный предел текучести достигается при легировании азотом ($\sigma_{0,2}^{МКС\text{-}А} = 290$ МПа), тогда как добавление бора снижает прочностные характеристики сплава относительно азотосодержащего материала ($\sigma_{0,2}^{МКС\text{-}АБ01} = 280$ МПа, $\sigma_{0,2}^{МКС\text{-}АБ02} = 250$ МПа, $\sigma_{0,2}^{МКС\text{-}АБ05} = 240$ МПа), что может быть связано с сегрегацией бора на границах зерен. Анализ зависимости Холла-Петча показал значительный вклад элементов внедрения в зернограничное упрочнение: напряжение трения решетки в наиболее легированном сплаве ($\sigma_0^{МКС\text{-}АБ05} = 240$ МПа) вдвое выше его значения в базовом сплаве ($\sigma_0^{МКС} = 120$ МПа). Однако при увеличении содержания бора коэффициент Холла-Петча уменьшается от 825 МПа × мкм$^{1/2}$ до 80 МПа × мкм$^{1/2}$, что указывает на снижение эффективности зернограничного упрочнения.

Легирование исходного сплава МКС азотом и бором оказывает существенное влияние и на его пластичность, увеличение которой от ≈ 30 % до ≈ 90 % наблюдается на диаграммах «напряжение–деформация». Этот факт обусловлен совокупностью причин: стабилизацией ГЦК-аустенита в азот- и борсодержащих сплавах, активацией в них TWIP механизма, а также возиожным изменением строения границ зерен. Эти результаты коррелируют с данными анализа параметров Холла-Петча, что указывает на уменьшение барьерной роли границ и, как следствие, на облегчение передачи пластической деформации через них при легировании МКС сплава бором.

Таким образом, показано, что легирование азотом и бором оказывает комплексное влияние на механические свойства многокомпонентного сплава $Fe_{50}Mn_{30}Co_{10}Cr_{10}$, обеспечивая повышение прочности за счёт твердорастворного упрочнения и существенное увеличение пластичности за счёт стабилизации ГЦК-аустенита и изменения характера зернограничного упрочнения.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-19-00197, https://rscf.ru/project/25-19-00197/. Исследования выполнены на оборудовании ЦКП «Нанотех» ИФПМ СО РАН.

Литература

1. B. Cantor. Multicomponent high-entropy Cantor alloys // Prog. Mater. Sci., 2020, 120.
2. Zhang W., Liaw P.K., Zhang Y. Science and technology in high-entropy alloys. Sci. China Mater., 2018, 61, 2 – 22.
3. Astafurova, E.G., Reunova, K.A., Melnikov, E.V., Panchenko, M.Yu., Astafurov, S.V., Maier, G.G., Moskvina, V.A. On the difference in carbon- and nitrogen-alloying of equiatomic FeMnCrNiCo high-entropy alloy. Mater. Lett., 2020, 276.
4. Seol J.B., Bae J.W., Li Z., Han J.C., Kim J.G., Raabe D., Kim H.S. Boron doped ultrastrong and ductile high-entropy alloys Acta Mater., 2018, 151, 366 – 376.
5. Aguilar-Hurtado J.Y., Vargas-Uscategui A., Torres-Mejia L.G., Mujica-Roncery L., Zambrano-Mera D., Pantaleone S., Wang B., Rosenkranz A., Paredes-Gil K. Experimental and computational analysis of stacking fault energy in B-doped $Fe_{50-X}Mn_{30}Co_{10}Cr_{10}B_X$ multi-principal elements alloys. J. Alloys Compd., 2023, 969.
6. Ding C.D., Jiao Z.B., Luan J.H., Xu B.B., Li R., Cao B.X., Zhou C.S., Liu W.H. Suppressing hydrogen embrittlement of a CrCoNi medium-entropy alloy by triggering co-segregation of carbon, boron, and Cr Corros. Sci., 2024, 236.

РОЛЬ ЗЕРНОГРАНИЧНЫХ ДИСЛОКАЦИЙ, ВЫДЕЛЕНИЙ И СЕГРЕГАЦИЙ ПРИМЕСЕЙ В УПРОЧНЕНИИ И ПЛАСТИЧНОСТИ УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТЫХ АЛЮМИНИЕВЫХ СПЛАВОВ: ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ФАКТЫ И ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ

М.Ю. Гуткин[1], Н.В. Скиба[1], Т.С. Орлова[2]

[1]*Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург*
[2]*Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург*
m.y.gutkin@gmail.com

Благодаря своему низкому удельному весу, хорошей электропроводности и коррозионной стойкости алюминиевые сплавы широко используются в электротехнике, автомобилестроении, авиастроении, кораблестроении и в других отраслях промышленности. Однако крупнозернистые алюминиевые сплавы обладают низкой прочностью, что ограничивает область их практического применения. Обработка алюминиевых сплавов методами интенсивной пластической деформации (ИПД) приводит к измельчению зеренной структуры и к значительному повышению прочности этих сплавов. В случае ультрамелкозернистых (УМЗ) сплавов Al-Cu-Mg [1], Al-Cu-Zr [2] и Al-Mg-Zr [3], структурированных методами ИПД, дополнительное упрочнение достигается за счет действия новых механизмов, которые связаны с формированием нановыделений и/или сегрегаций из примесных атомов на границах зерен (ГЗ) и на их тройных стыках в процессе формирования УМЗ структуры. При этом УМЗ алюминиевые сплавы, структурированные методами ИПД, в большинстве случаев показывают значительное снижение пластичности по сравнению со своими крупнозернистыми аналогами. В то же время, недавно удалось на примере сплавов Al-Cu-Zr [2] и Al-Mg-Zr [4] добиться значительного повышения их пластичности при сохранении высокой прочности после специальной термомеханической обработки (ТМО), которая заключалась в низкотемпературном отжиге и последующей небольшой деформации методом кручения под высоким давлением (КВД).

В докладе рассмотрены основные экспериментальные факты и предложенные недавно теоретические модели, описывающие роль зернограничных дислокаций, выделений и сегрегаций примесей в упрочнении и пластичности УМЗ алюминиевых сплавов. В этих моделях предполагалось, что ключевую роль в пластической деформации таких сплавов, обработанных методом КВД, играют внесенные зернограничные дислокации (ВЗГД), скользящие вдоль неравновесных ГЗ и образующие дислокационные скопления в тройных стыках ГЗ.

В модели [5], описывающей новый микромеханизм упрочнения в УМЗ сплаве Al-Cu-Zr, подвергнутом КВД, предполагалось, что наноразмерные выделения фазы Al_2Cu на ГЗ препятствуют скольжению ВЗГД, что приводит к значительному увеличению прочности этого сплава. В рамках этой модели пластическая деформация происходит за счет эмиссии решеточных дислокаций из скоплений ВЗГД, поджатых к тройным стыкам ГЗ. Показано, что разделение выделениями Al_2Cu скользящих ВЗГД на отдельные скопления может приводить к повышению критического напряжения такой эмиссии решеточных дислокаций и к существенному упрочнению сплава.

Теоретическая модель [6] описывает микромеханизм повышения пластичности в УМЗ сплаве Al-Cu-Zr после отжига и небольшой дополнительной деформации. Показано, что в этом случае выделения фазы Al_2Cu по ГЗ становятся мощными источниками решеточных дислокаций при наличии около этих выделений большого количества ВЗГД. Эмиссия решеточных дислокаций такими выделениями обеспечивает более высокую пластичность по сравнению с эмиссией решеточных дислокаций из тройных стыков ГЗ.

Для описания микромеханизмов пластической деформации в УМЗ сплаве Al-Mg-Zr, структурированном методом КВД с образованием сегрегаций атомов Mg на ГЗ предложена

модель [7]. В рамках этой модели пластическая деформация происходит за счет эмиссии решеточных дислокаций из тройных стыков ГЗ, содержащих ряды ВЗГД, закрепленных на атомах Mg, которые образуют сегрегации на ГЗ. Эти сегрегации затрудняют скольжение ВЗГД и формирование из них скоплений вблизи тройных стыков ГЗ, снижая там концентрацию приложенного напряжения, что приводит к значительному упрочнению сплава. На основе этой модели рассчитаны пределы текучести УМЗ сплава Al-Mg-Zr после КВД и после дополнительной ТМО. Обсуждается увеличение пластичности сплава, вызванное применением такой ТМО.

Полученные в результате анализа этих моделей расчетные значения предела текучести и зависимости напряжения течения от степени пластической деформации демонстрируют хорошее качественное и количественное совпадение с экспериментальными данными.

Литература

1. T. Masuda, X. Sauvage, S. Hirosawa, Z. Horita. Achieving highly strengthened Al-Cu-Mg alloy by grain refinement and grain boundary segregation. Mater. Sci. Eng. A, 2020, 793, 139668.
2. T.S. Orlova, D.I. Sadykov, D.V. Danilov, M.Yu. Murashkin. Influence of decreased temperature on the plasticization effect in high-strength Al-Cu-Zr alloy. J. Alloys Comp., 2023, 931, 167540.
3. T.S. Orlova, T.A. Latynina, M.Yu. Murashkin, F. Chabanais, L. Rigutti, W. Lefebvre. Effects of Mg on strengthening mechanisms in ultrafine-grained Al-Mg-Zr alloy. J. Alloys Comp., 2021, 859, 157775.
4. T.S. Orlova, A.M. Mavlyutov, D.I. Sadykov, N.A. Enikeev, M.Yu. Murashkin. Effect of deformation-induced plasticity in low-alloyed Al-Mg-Zr alloy processed by high-pressure torsion. Metals, 2023, 13(9), 1570.
5 M.Yu. Gutkin, T.S. Orlova, N.V. Skiba. Grain-boundary nanoprecipitates-mediated mechanism of strengthening in Al-Cu-Zr alloy structured by high-pressure torsion. Mater. Phys. Mech., 2022, 50(3), 431-438.
6. М.Ю. Гуткин, Т.С. Орлова, Н.В. Скиба. Микромеханизм повышения пластичности в ультрамелкозернистом сплаве Al-Cu-Zr после отжига и дополнительной деформации. ФТТ, 2023, 65(5), 875-879.
7. Н.В. Скиба, М.Ю. Гуткин, Т.С. Орлова. Влияние зернограничных сегрегаций атомов Mg на механические характеристики ультрамелкозернистого сплава Al-Mg-Zr. Физ. Мезомех., 2025, 28(3), 80-90.

АНАЛИЗ СТРУКТУРНО-ФАЗОВОГО СОСТОЯНИЯ НОВЫХ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВОВ Ni-Co-Si-Ti-Al И Ni-Co-Si-Ti-Al-B

Д.И. Давыдов, К.Ю. Карамышев, Н.В. Пудова, М.В. Линцев, Ю.В. Хлебникова

Институт физики металлов УрО РАН им. М.Н. Михеева, г. Екатеринбург
davidov@imp.uran.ru

Интерметаллические сплавы с упорядоченной структурой представляют собой особую группу материалов, обладающих необходимым комплексом свойств для передовых конструкционных применений в современной промышленности, в аэрокосмической отрасли и энергетике для производства лопаток турбин, в автомобилестроении и т.д[1,2].

Работа посвящена созданию новых ВЭС сплавов Ni-Co-Si-Ti-Al и Ni-Co-Si-Ti-Al-B, изготовленных методом дуговой плавки, и оценке их структурно-фазового состояния после высокотемпературного отжига. Главная цель исследования заключается в выборе соотношения компонентов сплава и оптимального режима термообработки для получения структуры каркасного типа с преобладающей объемной долей упорядоченной интерметаллидной фазы (порядка 90%), являющейся матрицей и обеспечивающей высокий уровень прочности, и прослоек неупорядоченного твердого раствора на Ni-Co основе, для обеспечения необходимого уровня пластичности.

Сплавы выплавлены в дуговой печи в атмосфере аргона путём пятикратного переплава и последующей разливкой в изложницу Проведен гомогенизирующий отжиг атмосфере аргона при температуре 1000 С в течении 8 ч. Химический состав полученных слитков по данным EDS анализа приведен в таблице 1. Структурные исследования проводили с использованием сканирующего электронного микроскопа (СЭМ) Tescan MIRA LMS (Чехия), оснащенного приставкой энергодисперсионного (EDS) анализа Ultim Max 100.

Таблица 1. Химический состав исследуемых сплавов.

Сплав	Содержание элемента, ат.%					
	Ni	Co	Si	Ti	Al	B
Ni-Co-Si-Ti-Al	58,2	19,8	10,8	6,8	4,4	-
Ni-Co-Si-Ti-Al-B	58,18	19,8	10,8	6,8	4,4	0,02

В процессе кристаллизации сплавов Ni-Co-Si-Ti-Al и Ni-Co-Si-Ti-Al-B формируется дендритная неоднородность по сечению слитка (рис.1). Никель служит основой твердого раствора и главным каркасом для формирования первичных осей кристаллизации. Никель концентрируется в центральных зонах дендритов, обеспечивая высокую термическую стабильность основы. Кобальт изоморфно замещает никель в кристаллической решетке и также формирует оси дендритов. Алюминий обладает наибольшим запасом растворимости в кобальт-никелевой матрице, но при росте первых кристаллов (дендритов) вытесняется в жидкую фазу, поскольку имеет коэффициент распределения меньше единицы. Это приводит к прямой дендритной ликвации: оси зерен обеднены Al, а междендритные пространства и периферия слитка обогащаются им, образуя легкоплавкие эвтектические или интерметаллидные прослойки (γ'-фаза типа $L1_2$).

Микролегирование сплава Ni-Co-Si-Ti-Al бором в количестве 0,02 ат.% не привело к заметным изменения в литой структуры сплава. Отжиг снижает дендритную ликвацию и способствует образованию однородному распределению элементов во всем объеме слитка. На рис.1а представлена типичная микроструктура отожженного сплава Ni-Co-Si-Ti-Al с правильным тройным стыком зерен в центре участка.

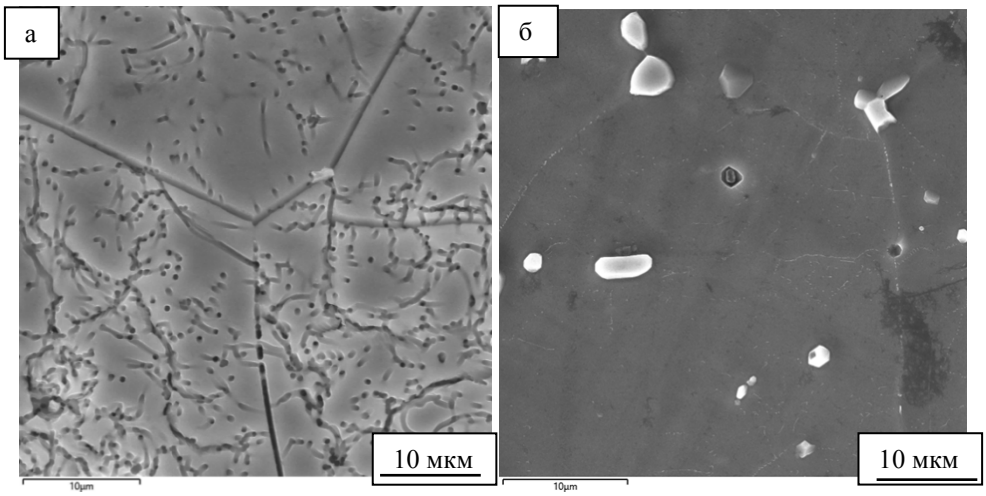


Рис.1. Электронное изображение участка структуры сплава Ni-Co-Si-Ti-Al(а) и Ni-Co-Si-Ti-Al-B(б) после отжига

Отчетливо видно, что граница зерна «двойная», что косвенно указывает на тонкую прослойку второй фазы по границе, химический состав которой отличается от состава матрицы в объеме зерна. Как показал ЭДС анализ, эти тонкие пограничные прослойки, в отдельных участках границ имеющие прерывистый характер, обогащены никелем и кобальтом. Алюминий и кремний в этих областях отсутствует. При этом титан распределен достаточно равномерно без заметной разницы в содержании как внутри, так и по границам зерна. Следует отметить также, что сформировалась внутризеренная субструктура, границы которой (как и границы зерен) обогащены никелем и кобальтом и обеднены (вплоть до полного отсутствия) по алюминию и кремнию. Можно предположить, что сохранившиеся субзеренные прослойки являются твердым раствором на основе никеля, а основная матрица – сложным интерметаллидом с типом кристаллической структуры $L1_2$.

В сплаве с добавкой бора Ni-Co-Si-Ti-Al-B, произошло измельчение зерна в процессе отжига (рис. 1б). Кроме того, несмотря на очень малую добавку бора, в процессе отжига сформировалась структура с выделениями частиц с характерным размером около 1-4 мкм, значительная часть которых имеет кристаллографическую огранку (рис. 1б). Как показал ЭДС анализ, эти частицы в составе содержат Co и Ti. Исходя из количественного соотношения Co и Ti в соотношении близком к эквиатомному, можно заключить, что частицы представляют собой упорядоченную интерметаллидную фазу CoTi типа B2.

Получены сплавы Ni-Co-Si-Ti-Al и Ni-Co-Si-Ti-Al-B, которые в исходном состоянии характеризуются дендритной ликвацией с обогащением осей дендритов никелем и кобальтом. Высокотемпературный отжиг сплавов приводит к устранению дендритной ликвации и формированию однородной зеренной и субзеренной структуры. В сплаве Ni-Co-Si-Ti-Al границы зерен и субзерен обогащены никелем и кобальтом и практически не содержат в своем составе алюминия и кремния. Легирование сплава бором приводит к измельчению зерна после отжига, что способствует повышению твердости и прочности, и к появлению в структуре интерметаллидных частиц CoTi с характерным размером 1-4 мкм, что является нежелательным фактором, который может привести к падению пластичности.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №26-19-00929, https://rscf.ru/project/26-19-00929/

Литература

1. T. Yang, B.X. Cao, T.L. Zhang, Y.L. Zhao, W.H. Liu, H.J. Kong, J.H. Luan, J.J. Kai, W. Kuo, C.T. Liu. Chemically complex intermetallic alloys: A new frontier for innovative structural materials. Materials Today, 2022, 52, 161-174.
2. Zhou, Y., Xiao, W., Wang, D. et al. Highly printable, strong, and ductile ordered intermetallic alloy. Nat Commun, 2025,16(1036), 1-9.

СТРУКТУРА МЕТАЛЛА, СФОРМИРОВАННОГО ЛАЗЕРНОЙ НАПЛАВКОЙ АЗОТСОДЕРЖАЩЕЙ ПРОВОЛОКИ

Н.А. Давыдова[1], Н.Н. Соболева[1], В.Е. Веселова[1], И.С. Бахтеев[2], А.В. Березовский[1, 2]

[1]*Институт машиноведения имени Э.С. Горкунова Уральского отделения Российской академии наук, Екатеринбург*
[2]*Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург*
davydova@imach.uran.ru

Разработка новых и импортозамещающих присадочных материалов для сварки, наплавки и аддитивных технологий является актуальной задачей машиностроения. Ранее авторами разработан опытный состав порошковой проволоки диаметром 1,6 мм системы легирования Fe-C-Cr-Mn-Ni-Mo-Cu-N, изготовленный на ООО «Завод сварочных материалов» (г. Берёзовский, Свердловская область). Электродуговое выращивание разработанной проволокой позволило сформировать аустенитно-ферритный фазовый состав наплавленного металла с содержанием азота 0,3%, при этом объемная доля δ-феррита составила 20%, что не соответствует необходимым 30-70% δ-феррита для дуплексных сталей. Ожидается, что использование лазерной технологии может способствовать увеличению доли дельта-феррита в структуре наплавляемого металла за счёт ускоренного охлаждения.

В связи с этим, целью настоящей работы явилась оценка возможности применения лазерного излучения для формирования качественных наплавленных слоёв с использованием разработанной порошковой проволоки, а также выбор оптимального режима для прямого лазерного выращивания крупногабаритных изделий.

Лазерную наплавку порошковой проволоки осуществляли на роботизированном лазерном комплексе, оснащенном иттербиевым волоконным лазером ЛС-5 и высокоточным промышленным роботом KUKA KR 60 HA. Исследовано влияние мощности (от 2 до 5 кВт) лазерного излучения на химический состав, геометрию, микроструктуру, уровень дефектности и микротвёрдость однослойных наплавленных покрытий из порошковой проволоки разработанного состава. На основании проведенных исследований выбран режим (мощность 3,0 кВт) лазерной наплавки, обеспечивающий низкую дефектность, достаточное тепловложение для растворения присадочной проволоки, меньшее перемешивание с материалом подложки, а также отсутствие существенного перегрева нижележащих слоев при последующей многослойной наплавке. По выбранному режиму выполнено прямое лазерное выращивание изделия высотой 50 мм. Сформированное изделие характеризовались сплошностью и равномерным распределением свойств по сечению. Показано, что сформированный лазерной аддитивной технологией металл имеет аустенитно-ферритную структуру с содержанием дельта-феррита в центральной части 36 % и соответствует дуплексным сталям.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-19-20059 (https://rscf.ru/project/24-19-20059/) и Правительства Свердловской области. Экспериментальные исследования выполнены с использованием оборудования ЦКП «Пластометрия» ИМАШ УрО РАН.

ТВЕРДОФАЗНОЕ СОЕДИНЕНИЕ НИОБИЯ И АЛЮМИНИЯ

В.Н. Даниленко[1], С. Б. Шугубаева[2], Л.У. Киеккужина[1]

[1]*Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа*
[2]*Уфимский университет науки и технологий, Уфа*
vdan@anrb.ru

Достижение комбинации наилучших свойств, не присущих каждому из исходных материалов по отдельности – одна из задач создания композитов. Особый интерес представляют методы твердофазного соединения, позволяющие получать композиты без расплавления исходных компонентов [1]. Формирование соединения в этом случае обеспечивается за счёт интенсивной пластической деформации и диффузионного взаимодействия материалов. Одним из методов твердофазного получения композитов является кручение под высоким давлением. Данный способ получения композиционных материалов в сочетании с последующим отжигом позволяет формировать надёжное соединение упрочняющей фазы с матрицей [2,3].

Особый интерес представляет бинарная система Al–Nb. В большинстве работ для получения композитов в этой системе используется схема укладки исходных пластин Al–Nb–Al, тогда как влияние схемы Nb–Al–Nb и весового соотношения исходных компонентов на формирование композитов не изучено.

Целью данной работы является исследование влияния укладки и весового соотношения исходных пластин на процессы твердофазного соединения ниобия и алюминия при кручении под высоким давлением и последующей термической обработке на формирование структуры и фазового состава металломатричных композитов.

В данной работе использовали диски ниобия диаметром 12 мм марки НБ-1 и диски технически чистого алюминия диаметром 10 мм. Диски укладывали в стопку Nb–Al–Nb и деформировали кручением под высоким давлением 6 ГПа на 5 оборотов со скоростью 1 об/мин при комнатной температуре. Образцы отжигали при температуре 550^0C 30 мин. В образце № 1 весовое соотношение элементов было следующим: Al – 22,3%, Nb – 77,7%, а в образце №2: Al – 6,9% и Nb – 93,1%.

Методами рентгенофазового анализа установлено, что в образце №1 после деформации наряду с дифракционными максимумами Nb наблюдался максимум интерметаллида $AlNb_2$, а после отжига фиксировались дифракционный максимумы Al, Nb, $AlNb_2$, $AlNb_3$. В образце №2 после деформации интерметаллидные фазы не обнаружены, однако после отжига наблюдались дифракционные максимумы ниобия и интерметаллидов $AlNb_2$, $AlNb_3$.

Установлено, что при укладке исходных пластин Nb–Al–Nb в процессе кручения под высоким давлением и отжига наблюдалось образование интерметаллидных фаз $AlNb_2$ и $AlNb_3$, в отличие от работ [2,3], где при укладке Al–Nb–Al формировался интерметаллид Al_3Nb.

Литература

1. Ю.Д. Третьяков. Твердофазные реакции. М.: Химия, 1978. 360 с.
2. В.Н. Даниленко, С.Н. Галышев, Р.Р. Мулюков. Получение сплава алюминия с ниобием методом механического легирования сдвигом под давлением. Перспективные материалы, 2009, 7 94–97.
3. G. Korznikova, E. Korznikova, K. Nazarov, R. Shayakhmetov, R. Khisamov, G. Khalikova, R. Mulyukov. Structure and Mechanical Behavior of Al–Nb Hybrids Obtained by High-Pressure-Torsion-Induced Diffusion Bonding and Subsequent Annealing. Advanced Engineering Materials, 2020, 23(1) 2000757.

РАЗВИТИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ УСТАЛОСТИ В ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ

С. П. Дегтярева[1], **А.А. Ланин**[1], **С.А Пескишев**[2]

[1]*ОАО «Научно производственное объединение Центральный котлотурбинный институт им. И.И. Ползунова, Санкт-Петербург*

[2]*Санкт-Петербургский Государственный Морской Технический Университет, Санкт-Петербург.*

DegtiarevaSP@ckti.ru

Представлены результаты исследования термической усталости, как разновидности разрушения, присущей изделиям, подвергающимся многократным теплосменам (нагреву и охлаждению) в условиях эксплуатации. Принято считать, что разрушение термической усталости (ТУ) является следствием накопления повреждений, сопутствующих изменениям субструктуры, и достигаемого предельного состояния материала, которые развиваются в результате его пластической деформации, инициируемой стеснением свободной термической деформации в ходе изменений температуры [1-5]. В настоящей работе, с целью выяснения роли субструктуры в развитии термической усталости предпринято ее рентгенографическое исследование на примере аустенитной стали 12Х18Н10Т в ходе термоциклических испытаний (ТЦ) по режиму 100↔500^{0}С, выполнявшихся на образцах разработанной конструкции ДСП (Рис.1) с оригинальным способом варьирования пластической деформации в цикле ($\varepsilon_{пл/ц}$) [6].

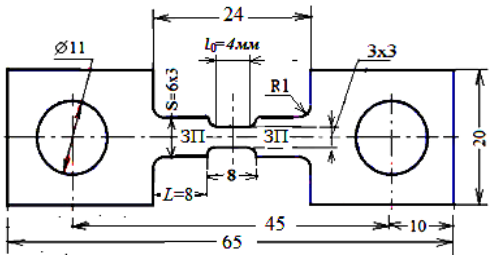


Рис.1 Плоский образец ДСП3 с заплечиками (ЗП) *L*=8 из комплекта образцов ДСП (*L*=4, 6, 8 и 12мм), используемых в ТЦ испытаниях с различной $\varepsilon_{пл/ц}$.

Инструментом исследования служил известный метод аппроксимации [7], который по уширению регистрируемых дифракционных линий (hkl) давал информацию о дефектах II-класса кристаллического строения твердого тела, называемых микродеформацией решетки (МКД) и его блочной структурой. Для сравнения была проведена съемка образцов, испытанных в условиях идентичных механическому нагружению, которую выполняли путем термического нагружения, многократно повторяя полуцикл охлаждения стесненного образца, который разрушался при деформации δ, а ширина линии Δβ(hkl) имела большую величину. В тоже время в ходе ТЦ испытаний, как показала рентгеносъемка, уширение линий и его изменение имело слишком малую величину даже при разрушении и соответствовало развитию блочной структуры в материале. Можно полагать, что ее появление обусловлено процессом полигонизации сплава, пластически деформируемого в полуциклах нагрева центральной зоны образца l_0 [8]. При этом ее более существенное проявление наблюдалось при повышении верхней температуры полуцикла до 600 и 700^{0}С и проявлялось в образовании «бочки» в зоне l_0 при нагреве и сжатии, что должно значительно уменьшать долговечность $N_{раз}$ (Рис.2). Это может быть связано с тем, что на ее участке больше сечение, ниже напряжения и должна отсутствовать пластическая деформация. При этом в остальной части зоны $\boldsymbol{l_0}$ величина $\varepsilon_{пл/цикл}$ должна существенно увеличиться в полуцикле охлаждения, т.к. стесняемая свободная деформация ε_0 остается неизменной.

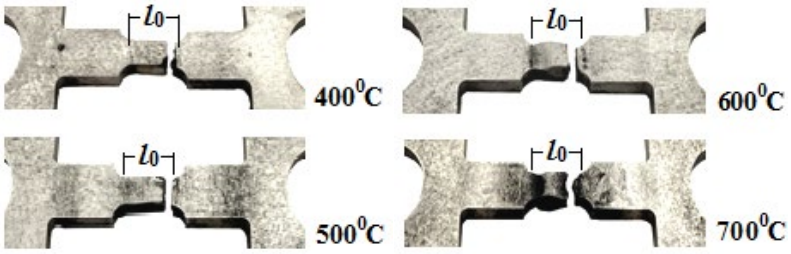


Рис.2 Зона развития разрушения в ТЦ испытаниях образцов ДСП3 при T_{max}= 400, 500, 600 и 700^{0}C.

Результаты исследования дают основания полагать, что развитие субструктуры на участке, подвергаемом пластической деформации, и события в области границ зерен, с которыми связано зарождение и развитие макротрещин, представляют собой два самостоятельных процесса. Считаем, что роль пластической деформации в образовании трещин и разрушении, состоит в том, что участвующие в ней дислокации и точечные дефекты выходят к границам сопрягающихся зерен и способствуют происходящим преобразованиям, завершающимся разрушением.

Литература.

1. Р.А. Дульнев, П.И. Котов. Термическая усталость металлов. М.: Металлургия.1980. 200с.
2. Б.М. Гугелев, Л.Б. Гецов, Ю.А. Журавлев, Е.Г. Новикова. Метод микроструктурного исследования повреждений в металлах при термической усталости. Заводская лаборатория. 1976. №1. С. 94–97.
3. Р.А. Дульнев, Т.В. Рыбина, Г.П. Пименова. Структурные признаки термоусталостного повреждения. Проблемы прочности.1973. №7. С.45-52.
4. Л.Б. Гецов. Метод оценки повреждаемости жаропрочных материалов. Заводская лаборатория. 1964. №1, С. 1371-1379.
5. Р.А. Дульнев. Суммирование повреждений и условие прочности при термоциклическом нагружении.//Проблемы прочности. 1971. №10. С.101-104.
6. Пат. 2845548 C1. Российская Федерация, G01N 3/60, G01N 3/32. Способ контроля термической усталости изделий, работающих в условиях теплосмен. / С.П. Дегтярева; заявл. 11.03.2025; опубл. 21.08.2025. Бюл.№24.
7. С.С. Горелик, Ю.А. Скаков, Л.Н. Расторгуев. Рентгенографический и электронно-оптический анализ. М.: «МИСИС». 2002. 358с.
8. Ю.М. Лахтин, В.П. Леонтьева Материаловедение. М.:Изд.«Машиностроение». 1980. 493 с.

СПЕЦИФИКА ТЕРМИЧЕСКОЙ УСТАЛОСТИ СВАРНЫХ ИЗДЕЛИЙ, РАБОТАЮЩИХ В РЕЖИМЕ ТЕПЛОСМЕН

С.П. Дегтярева[1], А.В. Демко[2], Е.В. Земляков[2], А.А. Ланин[1]

[1]ОАО «Научно производственное объединение Центральный котлотурбинный институт им. И.И. Ползунова, Санкт-Петербург

[2]Санкт-Петербургский Государственный Морской Технический Университет, Санкт-Петербург

DegtiarevaSP@ckti.ru

В самых различных отраслях промышленности выполнение изделий и их восстановление осуществляют посредством сварочных работ. Это приводит к локальному изменению их физико-механических и прежде всего прочностных свойств. Особенно это касается изделий, работающих в условиях регулярных теплосмен, которые сопровождаются термическим расширением-сжатием образующих их материалов. Их компенсация осуществляется посредством упругопластической деформации материала, которая инициирует зарождение и развитие трещин, приводящее к разрушению [1]. Специфика данного процесса в сварных изделиях – это его возможная локализация в области сварного соединения. Анализ имеющихся данных показал, что влияние сварного шва обнаруживается при совмещении его с зоной l_0, в которой стеснение свободной термической деформации материала компенсируется пластической деформацией.

В данной работе проведено исследование термической усталости посредством термоциклических испытаний на образцах из сплава 12Х18Н10Т, имитирующих условия стеснения термической деформации в изделиях, с варьированием пластической деформации в зоне их разрушения [2], в том числе за счет прилегающих к ней участков [3, 4] при сохранении температурного режима испытаний. Сварной шов в образцах создавали путем лазерной сварки с использованием при необходимости порошка указанного сплава.

Прежде всего, решался вопрос о возможном влиянии расположения сварного шва в изделии – в зоне (l_0) развития разрушения либо в прилегающих к ней участках, которые имитировались заплечиками образца. Сварной шов в заплечиках соединял две части исходного образца, разрезанного электроискровым методом на различном расстоянии от зоны l_0 перпендикулярно их оси. Проведенное исследование показало, что сварное соединение предварительно разрезанных образцов практически не изменяет долговечность N_p, а также величину уширения рентгеновских дифракционных линий $\Delta\beta(hkl)$ [5], характеризующих изменение субструктуры материала в ходе термоциклических испытаний.

Существенно иная картина наблюдалась в образцах, которые разрушились в предшествующем термоциклическом испытании и были сварены по линии трещин. Долговечность N_p сваренных образцов после испытания была в 4 – 5 раза меньше исходной, которая составляла $N_p(ср)=2456$ циклов. При этом вновь образовавшаяся трещина располагалась всегда напротив заваренной, т.е. с противоположной стороны зоны l_0. Это развитие событий повторялось и после всех последующих завариваниях трещин на испытываемом образце (рис.1). В тоже время изменение уширения $\Delta\beta(hkl)$ оставалось минимальным.

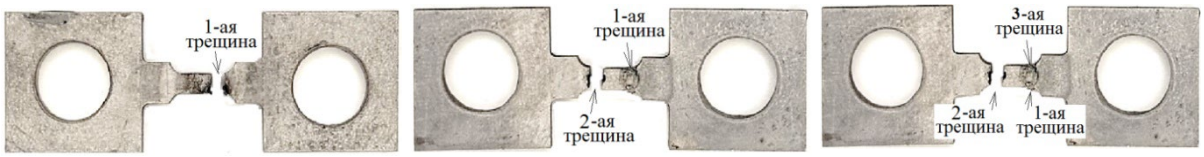


Рис.1. Испытание образца в исходном состоянии и после заваривания трещин

Наблюдаемое развитие событий в образцах с многократным завариванием трещин, образовавшихся в результате термоциклических испытаний, объясняется, вероятно, тем что

развитие процесса разрушения сосредоточено в их центральной части и включает зону $l_{0,}$ где протекает пластическая деформация, и переходные участки к заплечикам образца – справа и слева, куда на границы зерен выходят из зоны l_0 дислокации, создавая и развивая зародыши трещин, а в дальнейшем и магистральную трещину вплоть до разрушения. Их выход на заплечики исключается недостаточным уровнем напряжений в них. В ходе ТЦ испытания это происходит одновременно в области обоих переходов к заплечикам (слева и справа) и достигнутое к моменту разрушения состояние сохраняется со стороны противоположной образовавшейся трещины. В испытании, выполняемом после заваривания трещины, ее месторасположение является исходным состоянием, со свойствами литого материала. Участок же с противоположной стороны, находится на уровне близком к разрушению и требуется совсем немного циклов нагружения N_p для его совершения.

Заключение.

1. Проведенный анализ и термоциклические испытания, выполненные на образцах из сплава 12Х18Н10Т в исходном состоянии и после заваривания в них трещин или программных разрезов, показали, что влияние сварного соединения на результат последующих теплосмен является случайным событием и возникает, главным образом, при его попадании в зону развития пластической деформации испытываемого материала.
2. После восстановления формы образца сваркой в нем сохраняется состояние материала, достигнутое в предшествующем испытании, во всех участках кроме области сварного шва.
3. Обращаем внимание, что при необходимости выполнения сварки во время работы изделия, подвергаемого периодическим теплосменам в условиях эксплуатации, после ее выполнения следует привести его материал в исходное состояние посредством термической обработки для восстановления ресурса.
4. Изделие со сваркой, предназначенное для работы в условиях теплосмен, следует проконтролировать – не совпадают ли его сварные швы с зоной разрушения термической усталости.
5. Представляется, что исследование роли сварки в отношении термической усталости изделий, требует продолжения для других видов сварки и иных сочетаний используемых материалов, нежели в проведенной работе.

Литература.

1. Р.А. Дульнев, П.И. Котов. Термическая усталость металлов. М.: Металлургия, 1980. 200с.
2. С.П. Дегтярева. Способ контроля термической усталости изделий, работающих в условиях теплосмен. Патент 2845548 С1. Российская Федерация, G01N 3/60, G01N 3/32; заявл. 11.03.2025; опубл. 21.08.2025. Бюл. №24.
3. С.С. Мэнсон. Температурные напряжения и малоцикловая усталость. М.: Машиностроение, 1974. 344с.
4. С.В. Серенсен, П.И. Котов. Об испытании при циклическом тепловом нагружении варьируемой жесткости в связи с исследованием термической усталости. Заводская лаборатория, 1959, 10, 1216 - 1223.
5. С.С. Горелик, Ю.А. Скаков, Л.Н. Расторгуев. Рентгенографический и электронно - оптический анализ. М.: «МИСИС», 2002. 358с.

СОЗДАНИЕ ПЛОТНОГО КОНТАКТА МЕЖДУ ИНТЕРФЕЙСАМИ ПОЛНОСТЬЮ ТВЕРДОТЕЛЬНОГО АККУМУЛЯТОРА

Ю.Ю. Дихтяр[1, 3], Б.И. Атанов[2, 4], И.И. Яковлев[1, 2], О.И. Капитанова[1, 2]

[1]*АНО Идея, Москва*
[2]*МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва*
[3]*Сколковский институт науки и технологий, Москва*
[4]*Институт физики твердого тела, Черноголовка*
yurydikhtyar@gmail.com

Потребность в портативных устройствах, пилотируемых дронах, автомобилях с электротягой и т. п. влечет за собой повышение требований к накопителям электрохимической энергии. Традиционные металл-ионные аккумуляторы (МИА) в качестве ион-проводящей среды используют органические растворители, обладающие повышенной пожароопасностью и налагающие ограничения на использование материалов с высоким (больше 4.2 В относительно Me^{n+}/Me) средним рабочим потенциалом. Этих недостатков лишены полностью твердотельные аккумуляторы (all-solid-state batteries – ASSB), ключевым компонентом которых выступает твердотельный электролит, работающий одновременно как ион-проводящая среда и как сепаратор (благодаря отсутствию электронной проводимости). Несмотря на достигнутые высокие значения ионной проводимости остается нерешенной проблема плотного контакта и химической стабильности на границах твердый электролит – катод и твердый электролит – анод.

Данная работа направлена на снижение интерфейсного сопротивления твердотельного электрохимического элемента и повышения долговечности аккумулятора в условиях циклирования за счет разработки метода синтеза интерфейса (границы) между катодным материалом и керамическим твёрдым электролитом. Предложен интерфейс между катодным материалом и твердым электролитом на основе графитоподобного материала. Такой материал обладает демпфирующими свойствами и позволяет предотвратить нежелательные побочные реакции, а также аккумулировать на себе механические напряжения, возникающие из-за объемных изменений катода во время циклов заряда-разряда. В качестве такого демпфера выбрали композит, полученный после термической обработки полиакрилонитрила (ПАН) и литиевой соли. Далее, систему из катодного композита ($LiFePO_4$, ПАН, соль лития), демпфера и керамического образца твердого электролита со структурой NASICON'а ($Li_{1.3}Al_{0.3}Ti_{1.7}(PO_4)_3$) подвергли обработке в условиях «вакуумной сварки». Результаты электронной микроскопии показали, что предложенный подход позволил обеспечить эффективный физический контакт твердого электролита с катодным покрытием. Результаты спектроскопии ионного импеданса такой системы (против металлического Li) продемонстрировали снижение ионного сопротивления на границе электролит-катод. Это указывает на успешность применяемого метода для достижения высоких эксплуатационных показателей твердоэлектролитных ячеек.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (№ 24-79-10126)

ИССЛЕДОВАНИЕ УСЛОВИЙ ФОРМИРОВАНИЯ УСТОЙЧИВОЙ УПАКОВКИ ПОРОШКОВ Al–Fe/Fe_2O_3 ПРИ СМЕШИВАНИИ В БАРАБАННОМ СМЕСИТЕЛЕ

А.И. Дмитриев[1, 2], К.О. Акимов[1, 2], К.В. Иванов[1, 2]

[1]Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск
[2]Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск
dmitr@ispms.ru

Благодаря сочетанию уникальных свойств (малый вес, высокая удельная прочность, хорошая тепло- и электропроводность, коррозионная устойчивость во многих средах) многофазные сплавы на основе алюминия получили широкое применение в различных высокотехнологичных секторах промышленности. Например, использование в авиационных двигателях лопаток турбин, изготовленных из сплавов на основе TiAl, позволило снизить не только расход топлива, но и одновременно существенно уменьшить выбросы газов [1]. К недостаткам таких сплавов относят их относительно невысокие пластичность и вязкость, особенно при низких температурах, а также сложность и дороговизну металлургического производства, требующего специализированного оборудования и защиты от воздуха. Для улучшения высокотемпературных характеристик указанных конструкционных материалов могут быть использованы частицы железа [2], способствующее формированию в объёме сплавов мелкодисперсных интерметаллидов, необходимых для достижения высокой твердости. Чтобы воспрепятствовать данным процессам, в сплавы также часто вводят малорастворимые в матрице тугоплавкие твёрдые частицы – оксиды, карбиды, бориды, нитриды и интерметаллиды, которые активно препятствуют процессам рекристаллизации зёрен, повышают твёрдость и прочность матрицы. Однако, указанные частицы относительно дороги в получении и дефицитны. В этой связи наиболее многообещающим направлением представляется разработка оригинальной технологии синтеза композитов на основе вторичного сырья, а именно переработанной металлической стружки – отходов и побочных продуктов машиностроительных предприятий, ежегодный объем которых исчисляется десятками миллионов тонн. В качестве эффективного способа утилизации отходов предлагается подход получения алюмоматричных композиционных материалов, в которых материалы отходов металлообработки используются в качестве упрочняющих частиц в их естественном состоянии, без дополнительных затрат на очистку, подготовку и переработку. Это позволяет получать алюмоматричные композиты с оксидным упрочнением, минуя энергоемкие и экологически вредные этапы переработки стружки.

Очевидно, что пространственная упаковка исходных многокомпонентных смесей определяет равномерность контакта реагентов в процессе их последующих химических реакций и, как следствие, воспроизводимость микроструктуры продуктов получаемого композита. В настоящей работе этот вопрос исследуется на примере получения алюмоматричного композита на основе смеси порошка алюминия с добавлением в него упрочняющих частиц железа и оксида железа (Fe_2O_3), полученных после измельчения и окисления стружки. В отличие от сферического Al марки АСД-1 частицы стружки обладают угловатой нерегулярной морфологией и существенно большей плотностью (примерно в 2 раза для Fe_2O_3 и в 3 раза для Fe). Сочетание сложной формы и высокой плотности, с одной стороны, создаёт риск гравитационной сегрегации, а с другой ведет к механическому заклиниванию и формированию устойчивого контактного каркаса.

В работе исследуется количественная связь между объёмной долей угловатых частиц Fe/Fe_2O_3 и структурными параметрами упаковки (координационным числом, плотностью контактного каркаса, профилем контактных сил). Для этого была разработана и экспериментально валидирована численная трёхмерная модель на основе метода дискретных элементов в комплексе EDEM-Altair. Ключевым элементом модели является мультисферная модель, воспроизводящая угловатую нерегулярную форму тяжелофазных гранул Fe/Fe_2O_3,

форма которых была получена на основе данных растровой электронной микроскопии (РЭМ). Исследовались 3 состава с нарастающим содержанием Fe и Fe_2O_3: Состав 1 (90/10 Al/Fe по массе), Состав 2 (70/30) и Состав 3 (50/50). Процесс валидации был выполнен по стереологическому анализу 210 РЭМ-снимков шлифов реальных смесей при варьировании времени смешивания от 1 до 180 мин. Качество каждой упаковки оценивалось по индексу Лейси, вертикальному смещению центров тяжести и координационному числу.

Установлено, что объёмная доля угловатых частиц Fe/Fe_2O_3 является управляющим параметром качества упаковки исходной многокомпонентной смеси. При 10% железа устойчивая упаковка не формируется, а оптимальная конфигурация компонент смеси (индекс Лейси 0,863) достигается только после 30 минут перемешивания в смесителе, после чего начинается ее гравитационное расслоение. При 30% и 50% содержания железа угловатые частицы Fe/Fe_2O_3 формируют устойчивую упаковку уже через 5–15 минут перемешивания, которая сохраняется без нарастания сегрегации вплоть до 180 минут.

Таким образом, критическое содержание частиц Fe/Fe_2O_3 сложной формы определяет пороговую плотность упаковки, при которой контактный каркас становится перколирующим и целенаправленно блокирует гравитационное расслоение, обеспечивая высокую воспроизводимость структуры компакта.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 26-19-00195.

Литература

1 B.P. Bewlay, M. Weimer, T. Kelly, A. Suzuki, P.R. Subramanian. The science, technology, and implementation of TiAl alloys in commercial aircraft engines. MRS Proceed., 2013, 1516. doi:10.1557/opl.2013.44

2 X. Yan, X.-Q. Chen, A. Grytsiv, V.T. Witusiewicz, P. Rogl, R. Podloucky, V. Pomjakushin, G. Giester. Site preference, thermodynamic, and magnetic properties of the ternary Laves phase $Ti(Fe_{1-x}Al_x)2$ with the crystal structure of the $MgZn_2$-type, Int. J. Mater. Res., 2006, 97, 450–460. https://doi.org/10.3139/ 146.101238.

СТРУКТУРА И ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ШТЮТЦИТА И ГЕССИТА

Д.А. Долгий[1], Н.Н. Биккулова[1], Г.Р.Акманова[2], А.Р.Курбангулов[1], Д.А. Касьянов [1]

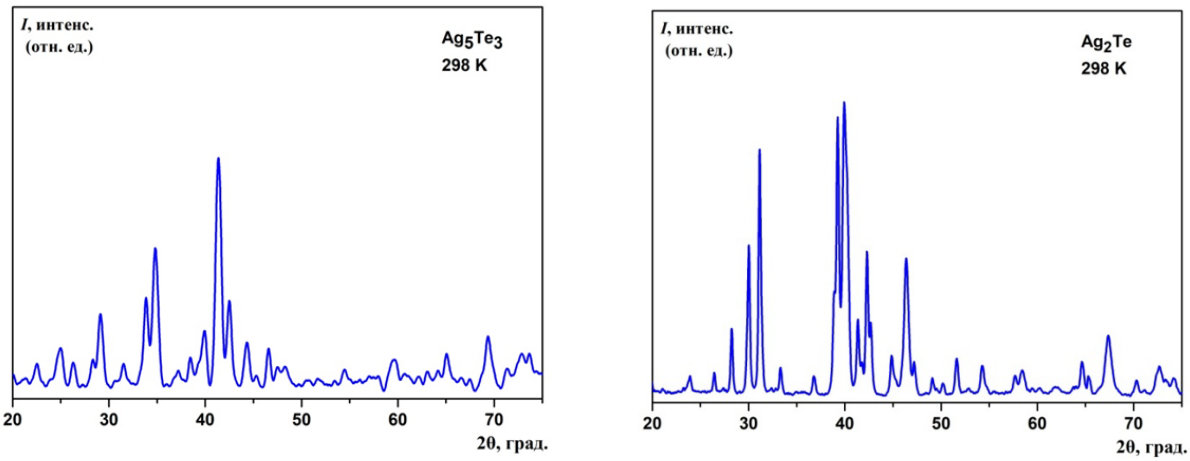
[1]*Стерлитамакский филиал Уфимского университета науки и технологий, Стерлитамак*

[2]*Уфимский университет науки и технологий, Уфа*
dolgdan2020@gmail.com

Теллурид серебра Ag_5Te_3 относится к соединениям, обладающими уникальными термоэлектрическими свойствами и высокой ионной проводимостью. Штютцит кристаллизуется в гексагональной сингонии с пространственной группой P6/mmm (α-модификация). Параметры элементарной ячейки: a = 4,44 Åc = 17,78 ÅZ = 2. Структура включает слои Ag-Te с координационными полиэдрами.

Теллурид серебра Ag_2Te, также известный под названием гессит, существует в виде нескольких полиморфных модификаций. При низких температурах стабильна фаза α-Ag_2Te, которая имеет моноклинную структуру, с классом решетки P21/b, параметрами a = 8,13 Å, b = 4,48 Åc = 8,09 ÅV = 271,43 Å^3, β = 112,9° и Z = 4 [1]. При повышении температуры выше 417 K (примерно 144 °C) теллурид серебра, переходит в β-фазу Ag_2Te с кубической кристаллической структурой. Параметр решетки a = 6,8 Å.

Для исследования электрофизических свойств и структуры материала были синтезированы образцы составов Ag_5Te_3 и Ag_2Te методом ампульного синтеза с последующим отжигом при температуре 300 °C в течении 150 часов. Однофазность образца была подтверждена на основе рентгеноструктурного анализа (РСА) с помощью рентгеновского дифрактометра ДРОН-4-07 (рис. 1).



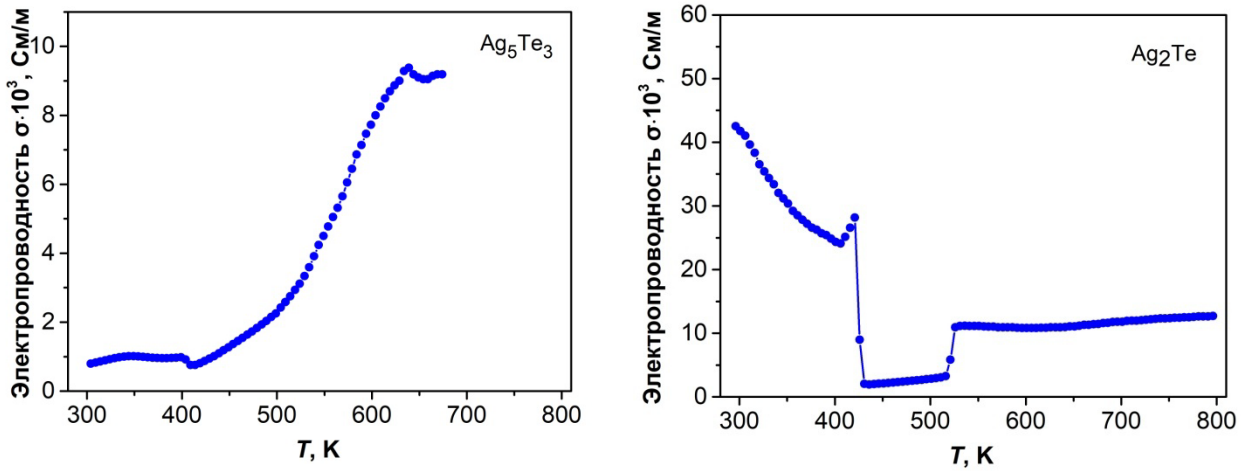
а) б)

Рис. 1. Дифрактограмма образцов Ag_5Te_3 (а) и Ag_2Te (б) при комнатной температуре

Исследование электропроводности (рис. 2) производилось четырехзондовым методом при силе тока 20 мА в интервале температур 300–675 К (Ag_5Te_3), 300 до 796 К (Ag_2Te).

Из полученных электрофизических измерений для Ag_2Te хорошо видно, что в области температуры 413–423 К происходит фазовый переход α→β из моноклинной сингонии в кубическую, который приводит к скачкообразному изменению как коэффициента электропроводности σ, так и коэффициента термо-эдсα. Кроме того, при данном фазовом переходе происходит изменение металлического типа проводимости на полупроводниковый. При температуре около 475 К наблюдается изменение знака коэффициента термо-эдс, который приводит к переходу от проводимости n-типа к p-типу. В температурной области

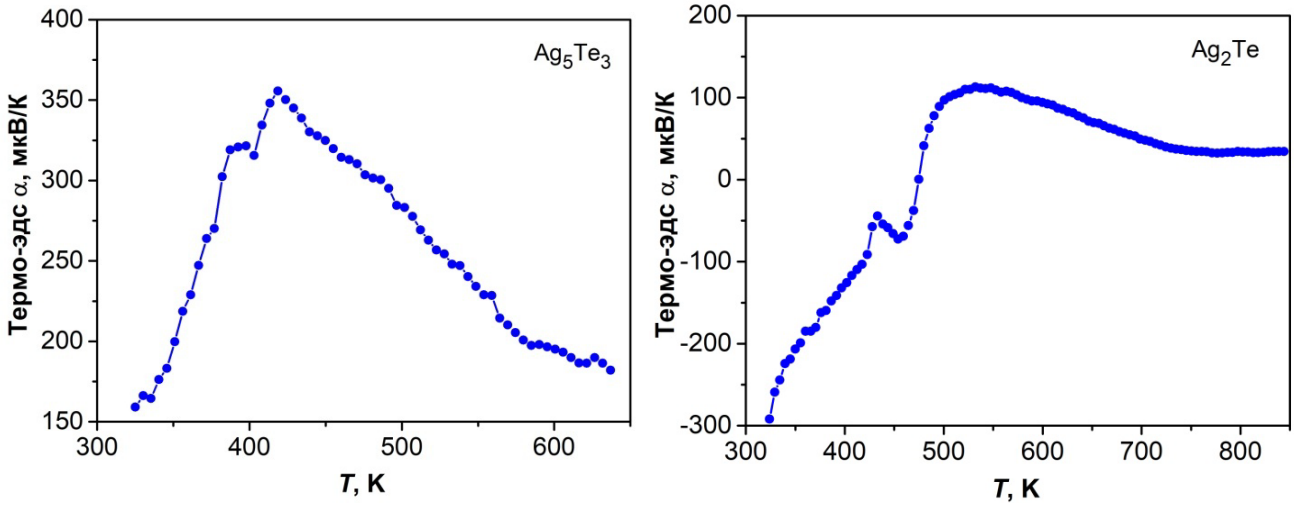
520–530 К происходит очередной фазовый переход, который сопровождается аномалиями на кривых зависимостей электропроводности и термо-эдс, однако при этом тип полупроводниковый р-тип проводимости сохраняется.



а) б)

Рис. 2. Зависимости электропроводности от температуры для соединений Ag_5Te_3 (а) и Ag_2Te (б)

Исследование термо-эдс (рис. 3) производилось на основе дифференциального метода в интервале температур 325–640 К (Ag_5Te_3) и от 324 до 844 К (Ag_2Te).



а) б)

Рис. 3. Зависимости термо-эдс от температуры для соединений Ag_5Te_3 (а) и Ag_2Te (б)

Согласно полученным результатам следует, что теллурид серебра состава Ag_5Te_3 является полупроводником р-типа (дырочная проводимость). Аномалии в зависимостях кривых электропроводности и термо-эдс в области температуры 420 К могут быть связаны с фазовым переходом и требует дополнительных исследований методами высокотемпературного РСА и калориметрии.

Литература

1. J. Schneider, H. Schulz X-ray powder diffraction of Ag_2Te at temperatures up to 1123 K. Zeitschrift fur Kristallographie, 1993, 203, 1–15.
2. А.Т. Бурков, А.И. Федотов, А.А. Касьянов, Р.И. Пантелеев, Т. Накама. Методы и устройства измерения термо-эдс и электропроводности термоэлектрических материалов при высоких температурах. Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2015, 15(2), 173–195.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМЫ И РАЗМЕРА АГЛОМЕРАТОВ ТЕХНИЧЕСКОГО УГЛЕРОДА В ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТАХ

А.В. Дуранова, С.С. Симакова

Омский государственный технический университет, Омск
avduranova@omgtu.ru

Полимерные композитные материалы с наполнителем из технического углерода (сажи) являются перспективными материалами для устройств электроники, обеспечивающими экранирование от электрических полей [1]. Основная проблема при создании таких материалов состоит в определении концентрации частиц технического углерода, обеспечивающей переход из диэлектрического в проводящее состояние. Такая переходная концентрация получила название порога электрической перколяции [2]. Основной особенностью структуры полимерных композитов с наполнителем из технического углерода является образование агломератов частиц сажи. Проводимость композита обеспечивается цепочками таких агломератов, между которыми либо осуществляется прямой контакт, либо реализуется туннельный эффект на малых расстояниях. Для исследования условий реализации проводимости необходимо знать распределение формы и размеров агломератов при различных концентрациях частиц технического углерода.

В качестве матрицы композита использовался линейный полиэтилен низкой плотности, в качестве наполнителя технический углерод марки OMCARB CH600. Отдельные частицы технического углерода имеют размер от 3 нм до 5 нм. Исследовались образцы с массовой концентрацией 5%. 8% и 10%. Изготовлялись образцы размером 10 см × 2 см × 3 мм. Методом холодного скола каждый образец делился на 10 частей. Поверхность скола исследовалась с помощью сканирующего зондового микроскопа Jeol JCM-5700. Проводился анализ фотографий, на которых выделялись агломераты частиц технического углерода. Пример фотографии с выделенными агломератами представлен на рисунке 1.

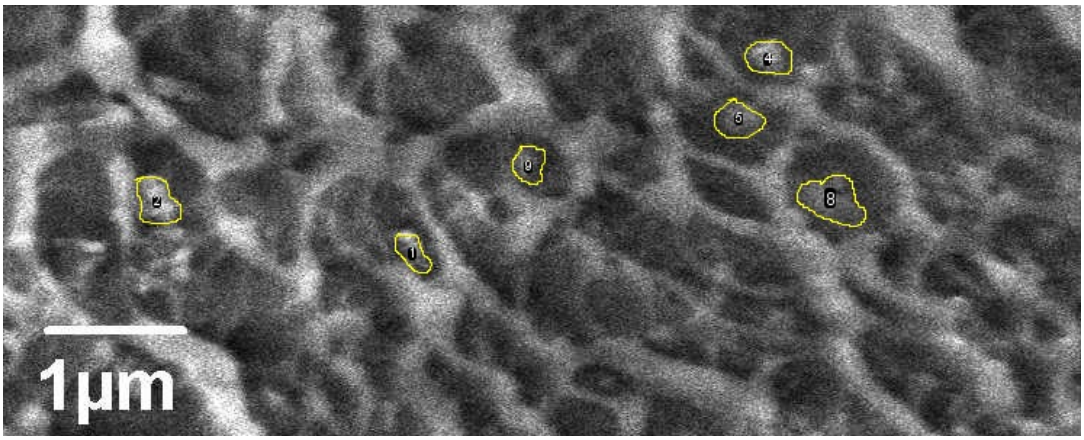


Рис. 1. Фотография образца полимерного композита с углеродным наполнителем при концентрации 5%. Сплошными линиями выделены границы агломератов частиц углерода.

Для каждой концентрации частиц углерода выделялось не менее 100 изображений агломератов. Для всех агломератов определялись максимальный и минимальный размер. На основе этих двух значений вычислялся средний размер агломерата L, а также его отклонение от круглой формы.

Анализ результатов показал, что средний размер агломератов имеет нормальное распределение. Проверка данной гипотезы по критерию χ^2 показала вероятность 0,99. При

этом средний размер агломератов растет при увеличении концентрации частиц технического углерода (Рисунок 2).

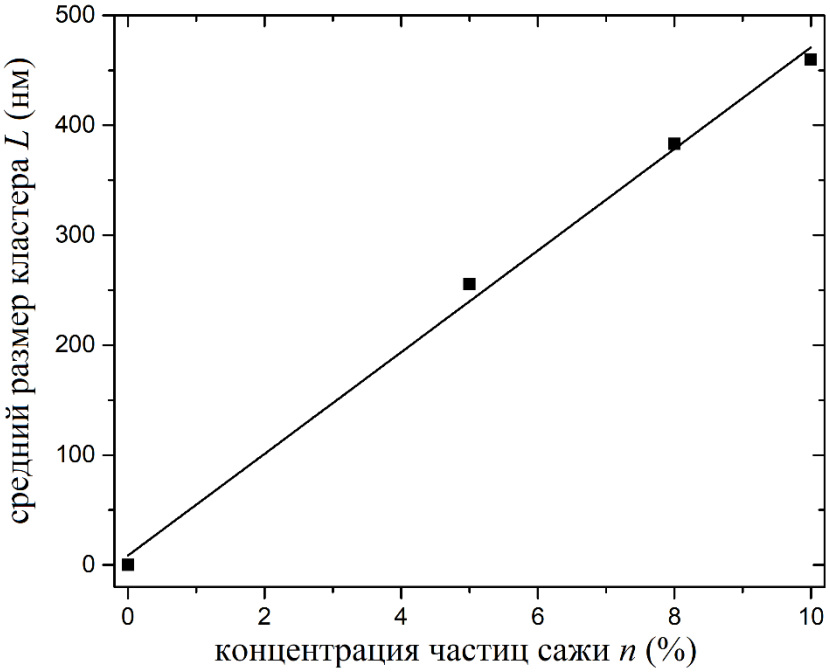


Рис. 2. График зависимости среднего размера агломерата частиц сажи от концентрации частиц в композите.

Как видно из графика зависимость размера агломератов от концентрации частиц технического углерода имеет линейный характер и может быть аппроксимирована соотношением:

$$L = (46{,}2 \pm 2{,}3)\, n \text{ (нм)}.$$

Увеличение размера агломератов может быть обусловлено механизмом их образования. Полимерная матрица имеет ячеистую структуру. При повышении концентрации углеродных частиц снижается объем полимерных частиц, используемых для создания материала. Вследствие этого увеличивается объем свободных ячеек, в которых формируются агломераты.

Таким образом, при исследовании вопросов проводимости композитных полимерных материалов с наполнителем из технического углерода необходимо учитывать рост размера агломератов. В качестве следствия можно указать увеличение толщины проводящих путей, снижающих электрическое сопротивление материала.

Исследования поддержаны грантом РНФ № 26-29-20003 и Правительством Омской области (соглашение № 23 от 08.07.2026).

Литература

1. L. Selvakumaran, G. Lubineauю Electrical behavior of laminated composites with intralaminar degradation: A comprehensive micro-meso homogenization procedure. Composite Structures, 2014, 109, 178-188.
2. Zhang W. et al. Advances in waterborne polymer/carbon material composites for electromagnetic interference shielding. Carbon, 2021, 177, 412-426.

МОДЕЛИРОВАНИЕ УПРУГОВЯЗКОПЛАСТИЧЕСКОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ АНИЗОТРОПНЫХ ТПМП-СКАФФОЛДОВ ДЛЯ ЗАМЕЩЕНИЯ ПОВРЕЖДЕННОЙ КОСТНОЙ ТКАНИ

Н.В. Еленская, В.М. Затонская, М.А. Ташкинов

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь
n.elenskaya@pstu.ru

Операции по замещению поврежденной костной ткани – одна из областей применения механических метаматериалов. Персонализированные решетчатые имплантаты, скаффолды, разрабатываются с учетом требований к физико-механическим свойствам и архитектуре поровых каналов [1]. Существуют различные подходы к проектированию скаффолдов на основе механических метаматериалов [2]. Один из параметрических подходов, который позволяет получать скаффолды с контролируемыми механическими свойствами, основан на концепции использований применение трижды периодических минимальных поверхностей (ТПМП) [3]. Пористая архитектура таких скаффолдов контролируется аналитическими выражениями что позволяет обеспечить механический отклик, близкий к естественным характеристикам костной ткани.

Целью данного исследования являлось моделирование упруговзякопластического отклика анизотропных скаффолдов на основе ТПМП из полилактида (PLA), в том числе в условиях контактного взаимодействия с костной тканью. Рассматривалась задача квазистатического сжатия в упруговязкопластической постановке с законом упрочнения Джонсона-Кука. Взаимодействие с костной тканью было учтено за счет условий скользящего контакта с заданным коэффициентом трения покоя в тангенциальном направлении. Оценивалось влияние архитектуры скаффолдов на объем пластических деформаций в отдельных структурных элементах спроектированных скаффолдов.

Результаты демонстрируют значительное влияние внутренней архитектуры скаффолда на его физико-механические свойства, как для всей структуры, так и в области контактного взаимодействия с костной тканью, а также на условия начала пластического деформирования в отдельных элементах конструкции. Показано, что выраженная анизотропия свойств скаффолда, вызванная его архитектурой, позволяет имитировать естественную анизотропию костной ткани, но делает скаффолд уязвимым к изменению условий нагружения, что требует особого контроля на этапе проектирования. Получено, что основная доля пластического деформирования скаффолда возникает в области контактного взаимодействия с костной тканью, оценено влияние площади контактной поверхности. Представленные данные расширяют возможности проектирования персонализированных имплантатов.

Исследование выполнено в Пермском национальном исследовательском политехническом университете при поддержке Российского научного фонда (проект № 25-79-00308).

Литература

1. M.V. Kiselevskiy et al. Development of bioactive scaffolds for orthopedic applications by designing additively manufactured titanium porous structures: a critical review. Biomimetics, 2023, 8(7) 546.
2. Y. Pirogova et al. Design of lattice structures for trabecular-bone scaffolds: comparative analysis of morphology and compressive mechanical behaviour. Biomech. Model. Mechanobiol., 2025, 24(5) 1535-1564.
3. N. Elenskaya, M. Tashkinov, V.V. Silberschmidt. TPMS-based scaffolds: Adaptation of morphological properties and mechanical response to reference tissue // Int. J. Solids Struct., 2025, 315 113366.

ИЗУЧЕНИЕ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ И ПОДВИЖНОСТИ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК СУЛЬФИДА СВИНЦА С ЛИГАНДАМИ

Н.В. Ермилов[1], Н.Н. Биккулова[2], Г.Р. Акманова[3], А.Р. Курбангулов[2]

[1] *ТДМ-ТЕХ, Москва*
[2]*Стерлитамакский филиал Уфимского университета науки и технологий, Стерлитамак*
[3]*Уфимский университет науки и технологий, Уфа*
mr.nikolai.ermilov@ya.ru

Экспериментальные исследования халькогенидов показывают, что высокая подвижность носителей заряда в квантовых точках PbS с Cl- и FA-лигандами может быть полезна для создания эффективных солнечных элементов.

В данной работе представлены результаты моделирования плотности состояний квантовых точек сульфида свинца (PbS) с лигандами хлора (Cl) и фтора (Fa). Моделирование проводилось с использованием теории функционала плотности в сочетании с методом неравновесных функций Грина и подходом молекулярной динамики Ландауэра [1].

Полученные данные моделирования плотности состояний показывают отчетливый пик в зоне проводимости вблизи уровня Ферми для квантовых точек с Cl-лигандами (выделен красной пунктирной линией на рис. 1).

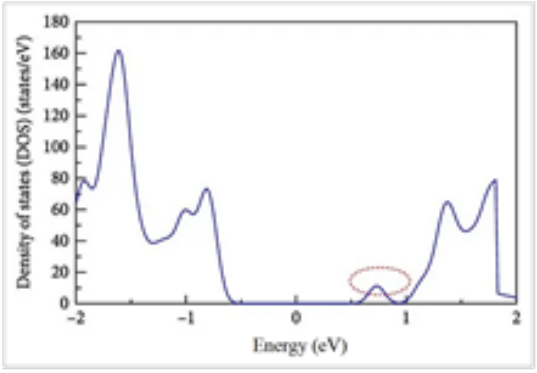


Рис.1. Плотность состояний квантовых точек PbS с хлорными (Cl) лигандами

Этот пик отсутствует в плотности состояний квантовых точек с FA-лигандами, при этом плотность состояний в зоне проводимости у последних в целом выше. Различие в плотности состояний может влиять на оптические свойства квантовых точек, что подтверждается данными оптического поглощения. Коэффициент оптического поглощения квантовых точек с Cl-лигандами также демонстрирует изолированный пик в области около 1,5 эВ, однако этот пик не наблюдается в данных для квантовых точек с FA-лигандами.

Можно было бы ожидать, что плотность носителей заряда в образце с FA-лигандами будет выше из-за более узкой запрещенной зоны. Ширина зоны для FA составляет 1 эВ, а на рис. 1 для Cl она составляет приблизительно 1,2 эВ. Для сравнения проводились отдельные расчеты для чистого PbS: значение ширины запрещенной зоны, полученное другими авторами, составляет ~0,41 эВ [2].

Однако плотность носителей заряда, полученная в результате тщательного анализа данных DFT-моделирования, продемонстрировала противоположную тенденцию. Этот эффект можно объяснить наличием множественных энергетических зон как в образцах без лигандов, так и в массивах квантовых точек PbS с Cl-лигандами.

Сложность процессов синтеза и характеризации делает полномасштабную экспериментальную оценку свойств материалов трудоемким и дорогостоящим процессом. В связи с этим поиск высокоэффективных соединений путем прямого перебора

экспериментальных данных сопряжен со значительными трудностями. Альтернативным подходом является использование высокопроизводительных вычислений, позволяющих оперативно обрабатывать массивы данных на распределенных вычислительных кластерах. Данный метод выступает в качестве перспективного инструмента для высокоскоростного скрининга функциональных материалов [3].

По результатам расчетов на рис.2 видно, что подвижность PbS с FAI выходит на плато в районе 0.1–0.4 $см^2/(V\ с)$. Это высокие значения для КТ, обусловленные сильным электронным взаимодействием между частицами благодаря лигандам FAI. При охлаждении ниже 100 К подвижность падает на несколько порядков, так как тепловой энергии недостаточно для преодоления барьеров между точками. Логарифмическая ось позволяет увидеть поведение носителей как в высокотемпературном режиме работы.

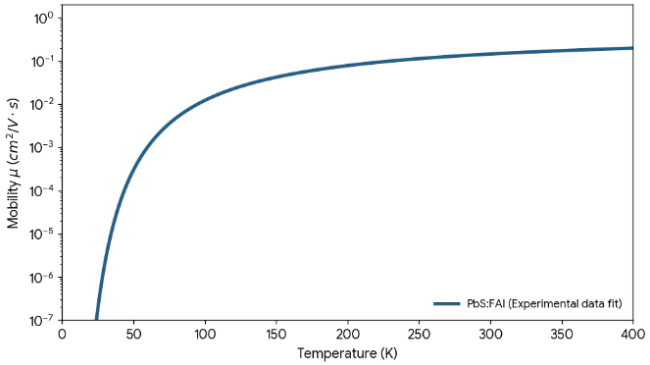


Рис. 2. Результаты расчетов подвижности PbS и PbS с лигандом FAI

Для чистого PbS график выглядит принципиально иначе (рис. 3). В отличие от КТ с

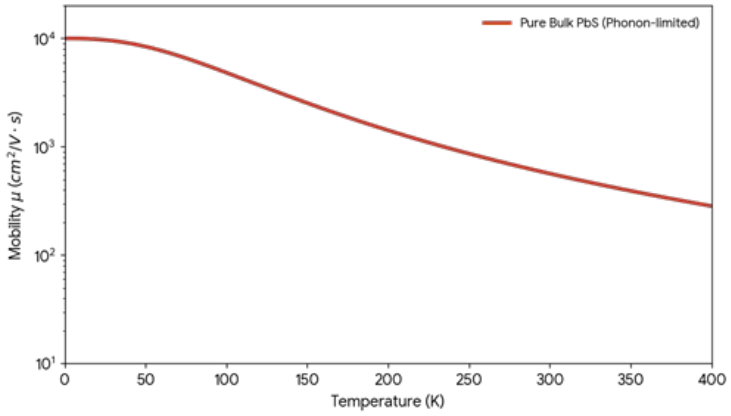


Рис. 3. Результаты расчетов подвижности PbS и PbS без лиганда

лигандом, где подвижность растет при нагреве (прыжковый транспорт), в чистом кристалле PbS подвижность падает с ростом температуры. Это происходит из-за усиления рассеяния носителей заряда на тепловых колебаниях решетки (фононах).

Хотя чистый объемный PbS обладает более высокой подвижностью, его высокая теплопроводность делает его неэффективным для термоэлектриков. PbS: FAI демонстрирует лучшие показатели благодаря коротким лигандам FAI. Подвижность в нем на порядки выше, чем в обычных КТ, что критично для поддержания высокого коэффициента мощности.

Литература

1. A.A. Rogalski. History of infrared detectors. Opto-Electronics Review, 2012, 20, 279-308.
2. O.N. Madelung. Semiconductors: Data Handbook. Springer, 2004, 51-56.
3. C.W. Glass, A.R. Oganov., N.G. Hansen. USPEX – evolutionary crystal structure prediction. Computer Physics Communications, 2006, 175, 11-12, 713–720.

МОРФОЛОГИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ АГЛОМЕРИРОВАННЫХ ПОРОШКОВ НА ОСНОВЕ ТАРНОГО СТЕКЛА, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ РАСПЫЛИТЕЛЬНОЙ СУШКИ

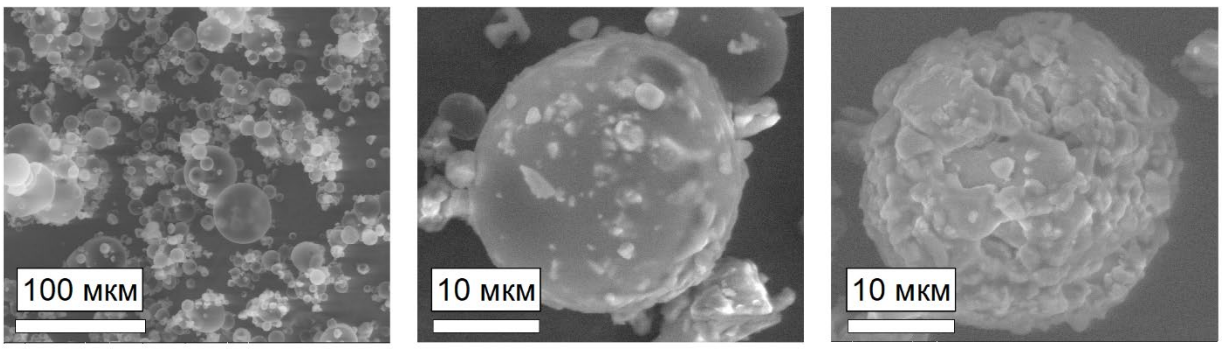
К.В, Ефремов, У.Ч. Баданов, Р.Ю. Бакшпнский, В.В. Шеховцов

Томский государственный архитектурно-строительный университет, Томск
kirillefremov068@gmail.com

Распылительная сушка широко применяется для получения агломерированных порошков с контролируемой морфологией, в том числе на основе диоксида кремния (SiO_2) и силикатных стекол [1]. Полученные порошки используются в катализе, аддитивных технологиях и при создании функциональных покрытий [2]. В данной работе основное внимание уделено формированию частиц из тарного силикатного стекла, поскольку его переработка методом распылительной сушки позволяет получать гранулы с заданной структурой и размером.

Эксперименты по получению агломерированного порошка диоксида кремния (SiO_2) проводились методом распылительной сушки на лабораторной установке YC-015. Технологические параметры соответствовали: температура теплоносителя на входе 160 °С; расход воздуха 0,75 $м^3$/мин и давление на форсунке 2 атм; подача суспензии 6,5 мл/мин. В качестве твердой фазы использовалось тарное силикатное стекло, предварительно измельченное в планетарной мельнице Fritsch Pulverisette 6 (мелющие тела ZrO_2, 10 мм, 200 г, 500 об/мин, 30 мин) до фракции <5 мкм; дисперсионной средой служил 2 % водный раствор поливинилового спирта (ПВС), выбранного ввиду его адгезионных свойств и контролируемого выгорания при сушке. Гомогенизация суспензии осуществлялась на магнитной мешалке US-1500S (350 об/мин, 30 мин, 40 °С), где повышение температуры до 40 °С способствовало снижению вязкости раствора ПВС, улучшению диспергирования твердой фазы и предотвращению преждевременной агломерации частиц. В экспериментах варьировалась концентрация твердой фазы от 0 до 30 %.

На рисунке 1 представлены электронные снимки полученных порошков при содержании твердой фазы в растворе от 0 до 30 %. Высушенный водный раствор 2 % ПВС (рис. 1, а) формирует тонкие полимерные плёнки или фрагментированные оболочки с гладкой поверхностью. Характерной чертой является наличие тонкостенных структур, что обусловлено отсутствием твёрдого наполнителя и полной усадкой раствора при испарении влаги. Диаметр частиц варьируется от 10 до 40 мкм.



а) *б)* *в)*

Рисунок 1. Электронные снимки полученных порошков:
а – водный раствор 2 % ПВС; *б* – 15 % твердой фазы; *в* – 30 % твердой фазы

Основной особенностью морфологии полученных частиц является переход от плёночной к глобулярно-агломерированной структуре с увеличением содержания твёрдой

фазы. При 15 % твёрдой фазы частицы приобретают сферическую или эллипсоидальную форму с шероховатой поверхностью (рис. 1, б). Наблюдаются единичные агломераты, состоящие из мелких первичных частиц (фракция <5 мкм), скреплённых полимерной связкой. Присутствуют вторичные дефекты в виде кратеров и локальных провалов. При 30 % твёрдой фазы формируются плотные сферические гранулы с развитой рельефной поверхностью, характерной для плотной упаковки мелких частиц SiO_2. Крупные пустоты или разрывы оболочки отсутствуют, агломераты выглядят монолитными.

Дальнейшие исследования будут направлены на оптимизацию технологических параметров распылительной сушки (температура теплоносителя, расход суспензии, давление на форсунке, концентрация связующего) с целью управления морфологией, размером и пористостью агломерированных частиц SiO_2 [3,4]. Особое внимание предполагается уделить получению частиц типа «ядро–оболочка», где центральная область формируется из плотноупакованного наполнителя, а внешняя оболочка — из более мелкодисперсной фракции или функционального компонента [5]. Такая архитектура позволяет сочетать механическую прочность ядра с контролируемой поверхностной активностью оболочки, что критически важно для последующей термической сфероидизации. При этом наличие оболочки предотвращает преждевременное плавление и коалесценцию частиц, обеспечивая сохранение сферической формы и монодисперсного распределения по размерам.

Литература

1. Kikuo Okuyama, Mikrajuddin Abdullah, I. Wuled Lenggoro, Ferry Iskandar. Preparation of functional nanostructured particles by spray drying. Advanced Powder Technology, 2006, 17(6) 587-611.
2. Wean Sin Cheow, Selina Li, Kunn Hadinoto. Spray drying formulation of hollow spherical aggregates of silica nanoparticles by experimental design. Chemical Engineering Research and Design, 2010, 88(5-6) 673-685.
3. Nooshin Saadatkhah, Marco G. Rigamonti, Daria C. Boffito, He Li, Gregory S. Patience. Spray dried SiO2 WO3/TiO2 and SiO2 vanadium pyrophosphate core-shell catalysts. Powder Technology, 2017, 316 434-440.
4. P. Groppe, J. Reichstein, S. Carl, C. Cuadrado Collados, B.-J. Niebuur, K. Zhang, B. Apeleo Zubiri, J. Libuda, T. Kraus, T. Retzer, M. Thommes, E. Spiecker, S. Wintzheimer, K. Mandel. Catalyst Supraparticles: Tuning the Structure of Spray-Dried Pt/SiO2 Supraparticles via Salt-Based Colloidal Manipulation to Control their Catalytic Performance. Small, 2024, 20 2310813.
5. S Y Azhary et al. Synthesis and characterization of chitosan: SiO_2 nanocomposite by ultrasonic spray drying. IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng., 2019, 550 012037.

ВЛИЯНИЕ ВСЕСТОРОННЕЙ ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ КОВКИ С ПОНИЖЕНИЕМ ТЕМПЕРАТУРЫ НА СТРУКТУРУ, МЕХАНИЧЕСКОЕ И КОРРОЗИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА 1570С

Р.Р. Загитов, О.Ш. Ситдиков, Е.В. Автократова, О.Э. Латыпова, М.В. Маркушев

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
Zagitov-rinat@mail.ru

Придание ультрамелкозернистой (УМЗ) структуры алюминиевым сплавам методами интенсивной пластической деформации (ИПД) заметно сказывается на параметрах их конструкционной прочности и структурной сверхпластичности (СП). Одним из эффективных методов измельчения зерен сплавов является всесторонняя изотермическая ковка (ВИК) с понижением температуры. Однако, для большинства алюминиевых сплавов снижение температуры деформации ниже температуры сольвуса сопряжено с риском выделения частиц по границам зерен, что может негативно повлиять на их служебные свойства.

Цель работы - оценить влияние ВИК с понижением температуры ниже температуры сольвуса β-фазы (Al_3Mg_2) на структуру и ее термическую стабильность, а также параметры статической прочности, сверхпластичности и коррозионной стойкости промышленного сплава 1570С (Al–5Mg–0.18Mn–0.2Sc–0.08Zr, мас.%).

Заготовки ø80×150 мм из гомогенизированного при 360°С в течение 6 часов слитка подвергли ВИК с понижением температуры в интервале 325 - 175°С до суммарной степени деформации $e \sim 24$, с высокотемпературной ступенью при 325°С до и $e \sim 12$. Структуру сплава изучали методами оптической, просвечивающей и растровой электронной микроскопии, включая EBSD-анализ. Механические свойства при комнатной и повышенных температурах оценивали по результатам испытаний на одноосное растяжение. Коррозионную стойкость определяли гравиметрическим методом (по потере массы в 1М HCl в течение 55 часов) и электрохимическим анализом с построением Тафелевских кривых (трехэлектродная ячейка с хлоридсеребряным электродом сравнения Ag/AgCl и графитовым вспомогательным электродом в растворе 3.5% NaCl + 1% HCl).

Установлено, что опробованный режим ВИК позволяет получать однородную УМЗ структуру с размером зерна около 1 мкм. При этом в зернах фиксировали высокую плотность дислокаций (~ 4×10^{13} м$^{-2}$), что свидетельствовало о значительной накопленной энергии деформации. Такая нагартованная УМЗ структура обеспечивала достижение повышенной прочности сплава при высокой его пластичности: предел текучести 320 МПа, предел прочности 390 МПа, относительное удлинение 32%. Такой уровень и баланс свойств был обусловлен, прежде всего, сочетанием эффектов зернограничного (Холла–Петча) и дислокационного упрочнения. Важным было также то, что завершение ВИК при температуре ниже сольвуса β-фазы предотвратило формирование непрерывной сетки этой фазы по границам зерен из-за постоянной смены оси приложения нагрузки и динамической рекристаллизации.

Оценка термической стабильности УМЗ структуры показала, что она стабильна при часовом отжиге вплоть до 400°С благодаря препятствованию миграции границ зерен дисперсоидами $Al_3(Sc,Zr)$. После же отжига при 425°С отмечали аномальный рост зерен.

Обнаружено, что, несмотря на пониженную термическую стабильность, сверхпластические свойства сплава после ВИК не претерпевают значимого ухудшения по сравнению с состоянием с 2-3 микронным зерном, полученным после высокотемпературной (при 325°С) ВИК [1]. При некотором сужение температурного интервала СП сплав демонстрировал удлинения до 1700% в интервале 350 – 450°С и скоростях до 5×10^{-2} с$^{-1}$. При этом при 350°С удлинения превышали 800% в диапазоне скоростей от 10^{-3} до 10^{-1} с$^{-1}$. Сделан вывод о том, что выбранный режим ВИК позволяет реализовать как

высокоскоростную, так и низкотемпературную сверхпластичность, что актуально для повышения эффективности производства сложнопрофильных изделий.

Результаты гравиметрических испытаний показали, что ВИК при 325°С значительно повысила коррозионную стойкость сплава: скорость коррозии слитка снизилась с 15.2 до 6.6 г/(м²·ч) за счет завершения гомогенизации и формирования однородной и равновесной УМЗ структуры в поковке. Снижение температуры ВИК до 175°С и формирование нагартованной УМЗ структуры с частицами β-фазы приводило к обратному результату - почти двукратному ухудшению коррозионной стойкости (скорость возрастала до 12.2 г/(м²·ч)). Аналогичную ситуацию фиксировали и методом Тафелевской экстраполяции: плотность тока коррозии после высокотемпературной ВИК снижалась с 13.89 до 9.95 мкА/см², а после ВИК при 175°С возрастала до 21.74 мкА/см².

Заключение

ВИК с понижением температуры является эффективным методом получения массивных заготовок из сплава 1570С с однородной УМЗ структурой с размером зерна ~1 мкм, обеспечивающей повышенную прочность с сохранением высокой пластичности. Показано, что, несмотря на снижение порога термической стабильности структуры почти до 400°С, такая обработка позволяет реализовать сверхпластические удлинения до 1700% в интервале 350–450°С и скоростях до 5×10^{-2} $с^{-1}$, а также более 800% при 350°С и скорости 10^{-1} с. При этом зафиксировано некоторое ухудшение коррозионной стойкости сплава по сравнению с состоянием после высокотемпературной ВИК вследствие формирования неравновесной УМЗ структуры с равномерно распределенными выделениями β-фазы.

Литература

1. E. Avtokratova, O. Sitdikov, M. Markushev, M. Linderov, D. Merson, A. Vinogradov, The processing route towards outstanding performance of the severely deformed Al–Mg–Mn-Sc-Zr alloy. Mater. Sci. Eng. A., 2021, 806 140818.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ РЕЗОНАНСНЫХ СВОЙСТВ ОРТОРОМБИЧЕСКОЙ ФАЗЫ ОКСИДА ГАЛЛИЯ

Ю.Т. Загуренко[1], Д.С. Ширяев[2], И.С. Полухин[2], Е.С. Колодезный[1]

[1]НИУ ИТМО, Санкт-Петербург
[2]ООО «Предиктивная сенсорика»
Julia.zagurenko@gmail.com

В последние годы оксид галлия (Ga_2O_3) стал привлекать внимание как перспективный широкозонный полупроводниковый материал [1]. Благодаря большой ширине запрещенной зоны (4.8–5.3 эВ), высокому электрическому полю пробоя, химической и термической стабильности, а также способности к спонтанной поляризации данный материал может быть использован в областях, недоступных для многих традиционных пьезоэлектриков, и в условиях высоких электрических полей, повышенных температур, агрессивных сред [1].

Оксид галлия существует в пяти различных фазах, обычно обозначаемых как α, β, γ, δ и κ(ε), из которых моноклинная β-фаза является единственной термодинамически стабильной фазой при комнатной температуре и самой распространенной. Остальные фазы могут быть синтезированы в виде тонких пленок и гетероструктур с использованием эпитаксиальных методов, не требующих высоких температур, близких к температуре плавления [2].

Особый интерес представляет орторомбическая κ-фаза оксида галлия. Она является следующей по стабильности после β-фазы, и, в отличие от последней, кристаллическая структура κ-Ga_2O_3 не обладает центром инверсии (пространственная группа $Pna2_1$), что обуславливает наличие спонтанной и деформационной поляризаций. Данная фаза характеризуется сильной анизотропией упругих и пьезоэлектрических свойств, что даёт возможность управлять резонансными характеристиками за счёт выбора кристаллографической ориентации плёнки [2]. Расчеты методом функционала плотности показывают наличие значительной спонтанной поляризации [3], а также выраженной анизотропии пьезоэлектрических коэффициентов и диэлектрических характеристик, значения которых сопоставимы с нитридными пьезоэлектриками, используемыми в акустоэлектронике [4]. Например, опубликованы результаты моделирования SAW-резонатора на основе κ-Ga_2O_3 с фазовыми скоростями 3169 м/с и 5319 м/с [5]. Эти особенности делают орторомбический оксид галия потенциально интересным материалом для электромеханических преобразователей и микроэлектромеханических систем (MEMS).

В связи с этим актуальной задачей является численное исследование собственных колебаний и пьезоэлектрического отклика κ-Ga_2O_3. Такое исследование позволяет оценить возможность применения материала в качестве основы для высокочастотных пьезоэлектрических резонаторов и определить влияние ориентации кристалла на их характеристики.

В работе выполнено численное моделирование резонансных мод κ-Ga_2O_3 в простейшей объемной геометрической конфигурации. При расчетах используются компоненты тензора упругости C_{ij} и компоненты пьезоэлектрического тензора e_{ij}, полученные методом функционала плотности в работах [6, 7]. Модель рассматривается в приближении малых деформаций, учёт анизотропии реализован путём задания материальных констант в кристаллографической системе координат с последующим поворотом относительно лабораторной системы, что позволяет строго описывать ориентационные зависимости упругих и пьезоэлектрических полей. Приведены:

1. Анализ собственных частот для выявления основных изгибных и крутильных мод.
2. Анализ в окрестности резонансов для получения импедансных характеристик и оценки добротности.

Литература

1. C. Sheng, S. Sasikumar, J. Chen, J. Ran, X. Li, B. Yang. Progress in piezoelectric thin films and MEMS devices. Materials Science in Semiconductor Processing, 2026, 210, 110675.
2. A.M. Smirnov, A.V. Kremleva, A.Yu. Ivanov, A.V. Myasoedov, L.A. Sokura, D.A. Kirilenko, Sh.Sh. Sharofidinov, A.E. Romanov. Stress–strain state and piezoelectric polarization in orthorhombic Ga2O3 thin films depending on growth orientation. Materials & Design, 2023, 226, 111616.
3. J. Kim, D. Tahara, Y. Miura, B. Kim. First-principle calculations of electronic structures and polar properties of (κ, ε)-Ga2O3. Applied Physics Express, 2018, 11(6), 061101.
4. J. Zhu, Z. Xu, S. Ha, D. Li, K. Zhang, H. Zhang, J. Feng. Gallium oxide for gas sensor applications: A comprehensive review. Materials, 2022, 15(20), 7339.
5. Z. Chen, X. Lu, Y. Tu, W. Chen, Z. Zhang, S. Cheng, S. Chen, H. Luo, Z. He, Y. Pei, G. Wang. ε-Ga2O3: An Emerging Wide Bandgap Piezoelectric Semiconductor for Application in Radio Frequency Resonators. Advanced Science, 2022, 9(32), 2203927.
6. S.D. Guo, H.M. Du. Piezoelectric properties of Ga2O3: a first-principle study. European Physical Journal B, 2020, 93, 7.
7. K. Shimada. First-principles study of crystal structure, elastic stiffness constants, piezoelectric constants, and spontaneous polarization of orthorhombic Pna21-M2O3 (M = Al, Ga, In, Sc, Y). Materials Research Express, 2018, 5, 036502.

ВЛИЯНИЕ ГОРЯЧЕЙ ДЕФОРМАЦИИ НА ФОРМИРОВАНИЕ МЕЛКОЗЕРНИСТОЙ СТРУКТУРЫ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГРАНУЛИРУЕМОГО ЖАРОПРОЧНОГО НИКЕЛЕВОГО СПЛАВА ВВ751П

Р.И. Зайнуллин, Ш.Х. Мухтаров, Р.В. Шахов, А.А. Ганеев, В.М. Имаев

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
zayn.rishat@imsp.ru

В ответ на возрастающие запросы авиастроения ведется совершенствование технологических процессов обработки жаропрочных высоколегированных никелевых сплавов. Для изготовления элементов газотурбинных двигателей, в частности дисков, из гранулируемых сплавов преимущественно используется метод горячего изостатического прессования (ГИП) с термообработкой. Данный подход обеспечивает экономическую целесообразность и позволяет производить изделия со сложной геометрией. Хотя эти сплавы традиционно относят к категории труднообрабатываемых, применение горячей деформации, как отмечено в работе [1, 2], открывает возможности для повышения их эксплуатационных характеристик.

Целью данной работы было повышение механических свойств жаропрочного гранулируемого никелевого сплава ВВ751П (Ni-10(Al, Ti, Nb)-34,5(Co, Cr, Mo, W, V, Hf)-0,057(C, B) (масс.%) за счет введения горячей деформации в процесс обработки. Этот сплав был разработан в качестве материала дисков ГТД, и используется в двигателе ПД-14. Исходный материал для исследований был поставлен в состоянии после ГИП и термической обработки. Микроструктура в состоянии поставки была однородная, средний размер γ зерен около 30 мкм. Крупные зернограничные выделения первичной γ' фазы были размером 1 - 2 мкм, вторичные внутризеренные выделения γ' фазы были размером 0,2 - 0,5 мкм. Объемная доля первичной γ' фазы составила около 5,5 %. В микроструктуре присутствовали карбиды размером не более 0,5 - 2 мкм, объемная доля около 1%. Температура полного растворения γ' фазы определена как T_s=1170±5°C. Для повышения деформируемости сплав был подвергнут отжигу при 1155 и 1170°C (2 ч) с медленным охлаждением. Испытания на сжатие проводили в изотермических условиях в интервале температур 1100 – 1175°C и начальных скоростей деформации 5×10^{-4} – 10^{-2} c^{-1} до степени ε ≈ 75% (e ≈1,39). Отжиг сплава при температуре 1170°C привел к росту γ зерен до 50 мкм. Медленное охлаждение привело к коалесценции γ' фазы. Присутствие крупных выделений γ' фазы способствовало улучшению горячей обработки сплава. Показано, что напряжения течения отожженного сплава были ниже, чем у сплава в состоянии поставки. Снижение напряжения течения связано с динамической рекристаллизацией сплава. Установлено, что горячая деформация в диапазоне температур 1125-1150°C и скоростей 5×10^{-3} – 10^{-2} c^{-1} на степень ε ≈ 75% приводит к формированию однородной мелкозернистой структуры с размером зерен 5-10 мкм. Анализ эволюции структуры при горячем изотермическом сжатии выявил, что рост рекристаллизованных зёрен идет преимущественно по границам исходных зерен, что указывает на прерывистый характер динамической рекристаллизации — механизм, типичный для сплавов с низкой энергией дефекта упаковки. В исходном материале повышенный коэффициент диссипации энергии пластической деформации был связан с локальной рекристаллизацией, спровоцированной потерей устойчивости течения, тогда как после отжига сплава эффективность горячей пластической деформации возрастала.

Сравнительные испытания механических характеристик показали, что деформированные образцы превосходят недеформированные по целому ряду параметров. При комнатной температуре и при 650°C зафиксирован рост предела прочности, а в интервале 20–750°C отмечено увеличение, как предела текучести, так и относительного удлинения. Испытания на ползучесть при 650°C/1078 МПа и 750°C/620 МПа подтвердили, что деформация ГИП сплава значительно повышает длительную прочность.

Изотермическая или квазиизотермическая деформационная обработка сплава позволила получить заготовки с мелкозернистой структурой. Последующая термическая обработка по различным режимам обеспечила формирование микроструктур с размером γ-зерен от 8 до 18 мкм и первичными и дисперсными вторичными выделениями γ′-фазы. Изготовленные из такого материала образцы при испытаниях на длительную прочность и ползучесть в обоих режимах (650°С/1078 МПа и 750°С/620 МПа) показали, что горячая деформация повышает механические свойства сплава по сравнению с термической обработкой ГИП сплава. При этом ресурс длительной прочности деформированного сплава превышал 110 часов. Сравнение длительной прочности с зарубежными жаропрочными никелевыми сплавами показало, что сплав ВВ751П в деформированном и термообработанном состояниях продемонстрировал схожие значения параметра Ларсона-Миллера как у сплавов FGH100 и AF115 [3, 4] и лучше, чем у сплава N18 [5].

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-29-00806, https://rscf.ru/project/25-29-00806/

Литература

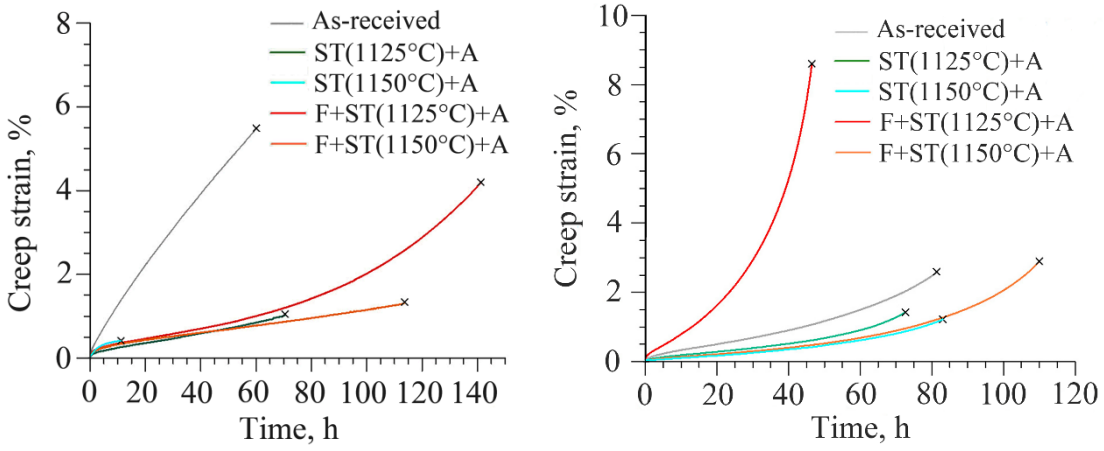
1. Е.И. Разуваев, М.В. Бубнов, М.М. Бакрадзе, С.А. Сидоров. Авиационные материалы и технологии. 2016, №S1 (43). 80-86.
2. R.I. Zainullin, S.K. Mukhtarov, A.A. Ganeev, R.V. Shakhov, V.M. Imayev. Effect of hot forging on formation of a fine-grained structure and mechanical properties of a powder metallurgy nickel base superalloy. Lett. Mater., 2023, 13(4s) 414-419.
3. C.L. Jia, C.C. Ge, Q.Z. Yan. Materials Science and Engineering A, 2016, V. 659 287-294.
4. H. Merrick, R.C. Benn, P.R. Bhowal. United States patent 6,468,368 B1, 22.10.2002.
5. J.Y. Guedou, J.C. Lautridou, Y. Honnorat. Superalloys, 1992, 267-276.

ВЛИЯНИЕ ДЕФОРМАЦИОННО-ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА МИКРОСТРУКТУРУ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГРАНУЛЬНОГО НИКЕЛЕВОГО СПЛАВА ВВ751П

Р. И. Зайнуллин, Ш.Х. Мухтаров, Р.В. Шахов, А.А. Ганеев, В.М. Имаев

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
zayn.rishat@yandex.ru

В настоящее время в некоторых газотурбинных двигателях используется гранульный никелевый сплав ВВ751П (Ni-10(Al,Ti,Nb)-34,5(Co,Cr,Mo,W,V,Hf)-0,057(C,B), мас.%). Однако механические свойства этого сплава в состоянии после горячего изостатического прессования (ГИП) и термообработки не всегда соответствуют высоким требованиям современных газотурбинных двигателей. В данной работе исходный сплав ВВ751П подвергали горячей ковке и обработке на твердый раствор (ОТР) при температурах ниже температуры сольвуса (приблизительно на 15-40 °С ниже температуры сольвуса γ′) с целью устранения первичных порошковых границ и измельчения исходной микроструктуры путем рекристаллизации. Для повышения эффективности рекристаллизации изучали влияние исходной микроструктуры на развитие рекристаллизации. Было установлено, что крупнозернистая γ′-фаза и зазубренные границы зерен способствуют динамической рекристаллизации, в то время как начальная дислокационная субструктура не оказывала заметного влияния. В качестве доминирующего механизма рекристаллизации была определена прерывистая динамическая рекристаллизация. На основе полученных результатов были изготовлены мелкозернистые поковки, которые впоследствии подвергались различным термическим обработкам и одинаковому старению. Горячая ковка привела к значительному улучшению прочностных характеристик и долговечности при ползучести при 650 °С/1078 МПа и 750 °С/620 МПа, как показано на рисунке 1. Это было достигнуто за счет устранения первичных порошковых границ, формирования мелкозернистой структуры (d_γ = 8 - 18 мкм) и мелкодисперсных выделений γ′-фазы.



а б

Рис. 1. Результаты испытаний на длительную прочность образцов сплава ВВ751П в различных структурных состояниях: исходном состоянии, в состоянии ГИП+ОТР1125℃+старение, ГИП+ОТР1150℃+старение, ГИП+ковка+ОТР1125℃+старение, ГИП+ковка+ОТР1150℃+старение: (а) 650 °С/1078 МПа и (б) 750 °С/620 МПа («×» указывает на разрушение образца)

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-29-00806, https://rscf.ru/project/25-29-00806/

СИНТЕЗ ПЛЁНОК ДИОКСИДА ТИТАНА УВЕЛИЧЕННОЙ ПОРИСТОСТИ И ИХ ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

О.В. Зайцев, Т.И. Гареев, Д.Г. Малыхин, Д.В. Сорокин, Д.В. Смовж

Институт теплофизики им. С.С Кутателадзе СО РАН, Новосибирск
o.zaitsev@g.nsu.ru

Плёнки диоксида титана известны своими фотокаталитическими свойствами, благодаря чему получили распространение в промышленности в качестве антибактериальных слоёв, антизапотевающих плёнок, самоочищающихся покрытий [1]. Для промышленного производства требуются масштабируемые методы, которые позволяют получать однородные покрытия с воспроизводимыми свойствами. Признанным промышленным стандартом является метод магнетронного распыления [2]. С точки зрения фотокатализа, наиболее интересным является взаимосвязь параметров синтеза и пористости получаемых покрытий, т.к. именно пористость определяет фотокаталитическую активность плёнок [3]. Известно, что на пористость влияют такие параметры синтеза, как общее давление синтеза, состав атмосферы, наклон и нагрев подложки [4-7]. В данной работе исследуется влияние ионного тока на пористость плёнок диоксида титана, и влияние эффекта Киркендалла при отжиге плёнок титана в кислородной атмосфере.

Эксперименты проводились на установке магнетронного распыления, конструкция которой схематично представлена на рисунке 1. Основу установки составляет вакуумная камера из нержавеющей стали объёмом 100 л, оснащённая турбомолекулярной системой откачки и системой напуска газа с регуляторами расхода. В верхней части камеры размещён вращающийся подложкодержатель, а также небольшой электрод, представляющий собой вольфрамовый стержень диаметром 3 мм, помещённый в кварцевую трубку с внутренним диаметром 5 мм. Цилиндр охватывает стержень по всей длине, оставляя открытым лишь торцевой участок длиной 3 мм. Открытый конец электрода обращён к держателю подложек и расположен на расстоянии 10 см от его центра. Электрод электрически изолирован от стенок камеры, напряжение на него подаётся независимо от основного питания магнетрона. Использование электрода в такой конфигурации позволяет создавать ионный ток на подложку различной плотности и энергетического спектра [8]. Магнетрон установлен на дне камеры и направлен на держатель подложек под углом 45°. Расстояние от центра катода до центра подложкодержателя составляет 10 см. Магнетрон состоит из: кольцевого анода и дискового катода (мишень) из титана чистотой 99,99% диаметром 3 дюйма. Отрицательное напряжение на катод подаётся от источника постоянного тока (Applied Electronics) с максимальной выходной мощностью 500 Вт.

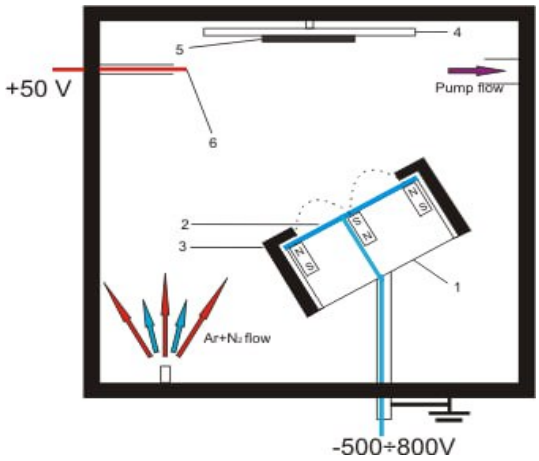


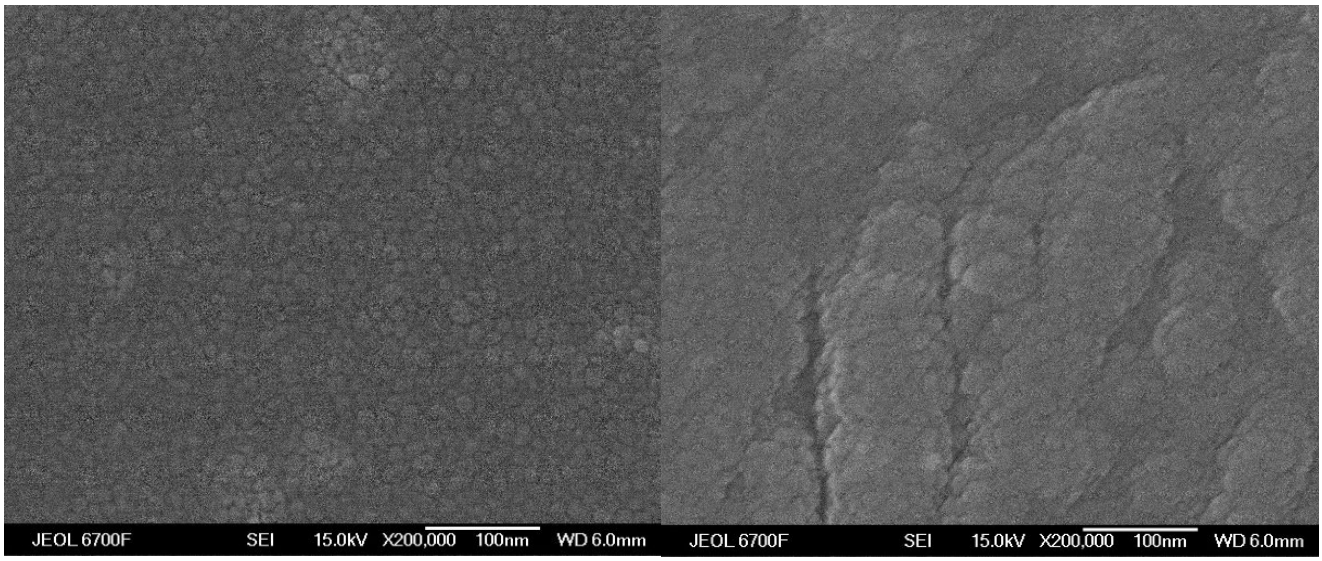
Рис. 1. Экспериментальная установка. 1 – магнетрон, 2 – катод-мишень, 3 – кольцевой анод, 4 – держатель подложки, 5 – подложка, 6 – малый анод.

Образцы титана после синтеза подвергалась термическому отжигу на воздухе при температуре и 700°C в течение 1 часа при атмосферном давлении. Пористость определялась как отношение изменений толщины плёнок после и до отжига к коэффициенту Пиллинга-Бэдвордса для титана (1,77). В итоге получены образцы плёнок диоксида титана, полученные синтезом в реактивной атмосфере, и плёнки диоксида титана, полученные синтезом в инертной атмосфере и последующим отжигом на воздухе. Каждая группа включает образцы, синтезированные с дополнительным электродом и без него. Сводная таблица использованных режимов синтеза представлена ниже. В качестве фотокаталитических свойств представлены измерения скорости фоторазложения органических красителей под действием ультрафиолетового излучения. На плёнки помещался раствор метиленового синего концентрацией 30 мкг/л в 2% раствор перекиси водорода общим объёмом 120 мкл и прижимался покровным стеклом. Измерения проводились на спектрофотометре СФ-2000 с шагом в 1 минуту. По аппроксимации пика поглощения мономера метиленового синего в районе 660 нм и отношению интегральных интенсивностей были получены оценки скорости фоторазложения.

Таблица 1. Использованные режимы синтеза.

Обозначение	Синтез	
	Распыление в $Ar+O_2$	Распыление в Ar + отжиг на воздухе
Без электрода	РБ	ОБ
С электродом	РЭ	ОЭ

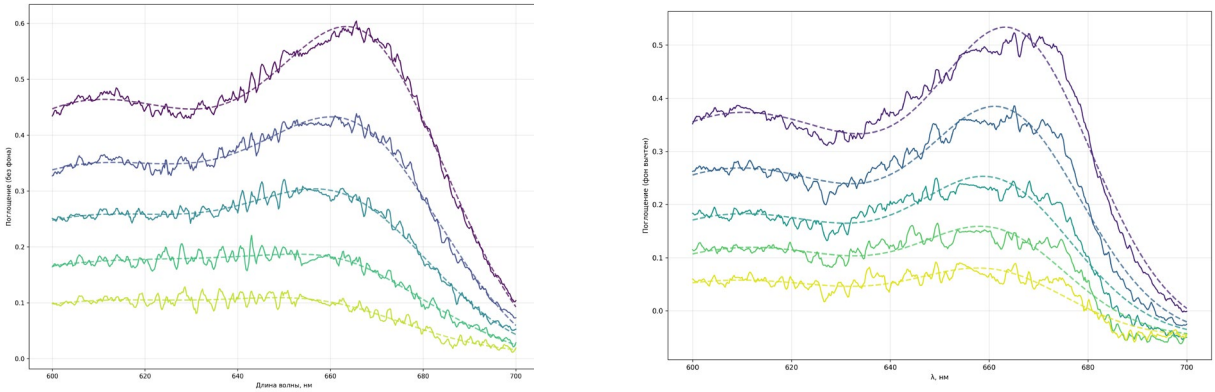
Полученные снимки СЭМ представлены на рисунке 2. В случае плёнок РБ и РЭ из снимков СЭМ видно, что по сравнению с однородной равномерной поверхностью РБ, плёнка РЭ имеет развитую поверхностную пористость. Образцы ОБ и ОЭ имеют пористость в 34% и 32%, что вызвано эффектом Киркендалла.



а Б

Рис. 2. Поверхностные снимки СЭМ образцов РБ (а) и РЭ (б).

На рисунке 3 представлена поминутная зависимость спектров фоторазложения для образцов РБ и РЭ, скорость фоторазложения составляет 0,7 нг/мин и 0,9 нг/мин.



а б

Рис. 3. Временная зависимость спектров фоторазложения образцов РБ (а) и РЭ (б).

В работе продемонстрировано два новых метода по созданию пористых покрытий с помощью метода магнетронного распыления. Использование постотжига позволяет создать объёмную пористость с помощь эффекта Киркендалла с характерным значением около 30%. Дополнительный ионный ток позволяет достичь развитой поверхностной пористости, что позволяет увеличить скорость фоторазложения в 1.2 раза. Комбинация этих методов позволит разработать метод синтеза высокоэффективных фотокаталитических поверхностей.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 24-19-00357) https://rscf.ru/project/24-19-00357/

Литература

1. J. Arun et al. Synthesis and application of titanium dioxide photocatalysis for energy, decontamination and viral disinfection: a review. Environmental Chemistry Letters, 2023, 21(1) 339-362.
2. A. Baptista et al. On the physical vapour deposition (PVD): evolution of magnetron sputtering processes for industrial applications. Procedia Manufacturing, 2018, 17 746-757.
3. Y. Sato et al. High rate deposition of photocatalytic TiO2 films by dc magnetron sputtering using a TiO2− x target. Journal of Vacuum Science & Technology A, 2008, 26(4) 903-907.
4. K. Yoshimura, T. Miki, S. Tanemura. TiO_2 electrochromic thin films by reactive direct current magnetron sputtering. Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films, 1997, 15(5) 2673-2676.
5. D. Jhajhria, P. Tiwari, R. Chandra. Planar microsupercapacitors based on oblique angle deposited highly porous TiN thin films/ ACS applied materials & interfaces, 2022, 14(22) 26162-26170.
6. M.A. Borysiewicz et al. Nanoporous copper films: How to grow porous films by magnetron sputter deposition. Crystals, 2024, 14(11) 965.
7. G.M. Arzac et al. Porous Cu thin films prepared by magnetron sputtering using helium as depositing gas. Surface and Coatings Technology, 2025, 132850.
8. O.V. Zaitsev et al. Synthesis of titaniferous films by the method of magnetron sputtering in a discharge with a small anode followed by annealing in nitrogen and air. Thermophysics and Aeromechanics, 2025, 32(4) 937-943.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ АРХИТЕКТУРЫ ТПМП-СКАФФОЛДОВ НА МЕХАНИЧЕСКИЙ ОТКЛИК СИСТЕМЫ «КОСТЬ-ИМПЛАНТАТ»

В.М. Затонская, Н.В. Еленская, М.А. Ташкинов

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь.
vmzatonskaja@pstu.ru

Рост числа травм, онкологических заболеваний и дегенеративных патологий увеличивает спрос на биосовместимые импланты, способные замещать утраченную кость и способствовать ее восстановлению. Для замещения костной ткани разрабатываются скаффолды – трёхмерные пористые структуры, способствующие росу новых клеток и формированию тканей, физико-механические свойства которых должны быть идентичны свойствам замещаемого фрагмента. Одним из перспективных направлений проектирования скаффолдов является подход, основанный на применении трижды периодических минимальных поверхностей (ТПМП) .

Целью данной работы являлось исследование влияния топологии элементарной ячейки на основе ТПМП и морфометрических параметров внутренней архитектуры скаффолдов на контактное взаимодействие с костной тканью. Для этого были спроектированы структуры с различными типами элементарных ТПМП-ячеек, архитектурной анизотропией и варьированием морфометрических характеристик ячейки. Прогнозировалось механическое поведение системы «кость-имплантат» в условиях квазистатического сжатия и контактного взаимодействия с условием скользящего контакта для случая трения покоя. Для оценки влияния архитектурной анизотропии на механические характеристики скаффолдов рассчитывался эффективный упругий отклик по трем направлениям. Анализировалось влияние площади контактной поверхности скаффолда на механический отклик системы «кость-имплантат». Механических отклик системы оценивался на основе данных о распределении напряжений в системе в целом и в области контактного взаимодействия.

Результаты исследования позволили выявить ряд скаффолдов, анизотропия свойств которых наиболее близка к анизотропии рассматриваемого фрагмента костной ткани. Выявлено влияние увеличения геометрической анизотропии скаффолда на жесткостные характеристики. Продемонстрировано влияние варьирования морфометрических параметров скаффолдов на механический отклик, в частности на характер распределения напряжений по объему структуры. Получено, что изменение морфометрических параметров скаффолда для увеличения площади контакта с костной тканью сильно требует индивидуального подхода для каждой топологии элементарной ячейки. Продемонстрировано, что рост коэффициента трения покоя приводит к расширению зоны контакта и изменению зон различных типов контактного взаимодействия. Полученные результаты расширяют возможности проектирования персонифицированных имплантатов для восстановления целостности костной ткани.

Исследование выполнено в Пермском национальном исследовательском политехническом университете при поддержке Российского научного фонда (проект № 25-79-00308).

ВЛИЯНИЯ ТЕРМОЦИКЛИРОВАНИЯ В УСЛОВИЯХ НЕСТАЦИОНАРНОЙ МЕТАЛЛУРГИИ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОГО АДДИТИВНОГО ПРОИЗВОДСТВА НА ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУРНО-ФАЗОВОГО СОСТОЯНИЯ Ti4Al3V

А.П. Зыкова, А.В. Воронцов, А.О. Панфилов, С.Ю. Тарасов

Институт физики прочности и материаловедения им. В.Е. Панина СО РАН, Томск

zykovaap@ispms.ru

Термоциклирование является неотъемлемым и одним из наиболее определяющих аспектов электронно-лучевого аддитивного производства (ЭЛАП). Процесс проволочного электронно-лучевого аддитивного производства характеризуется последовательным нанесением и плавлением проволоки с использованием сфокусированного электронного луча [1]. Термический цикл состоит из серии быстрых нагревов до температур выше линии ликвидус и последующего остывания, за которыми следуют циклы нагрева нижележащих слоев. Таким образом, любой элемент объема готового изделия проходит через уникальную термическую историю, состоящую из сотен таких циклов, каждый со своими специфическими параметрами. Основными параметрами, управляющими этим циклом, являются мощность электронного луча, скорость печати, скорость подачи проволоки, интервалы времени между проходами и слоями, а также применяемые методы охлаждения [1]. Эти параметры напрямую влияют на градиенты температуры, размер расплавленной ванны и, что наиболее важно, на скорость охлаждения, которая, в свою очередь, контролирует процессы зарождения и роста зерен, а также фазовые превращения.

Многократные циклы перегрева-охлаждения являются главными причинами формирования уникальной микроструктуры сплава Ti6Al4V. Эта микроструктура, как правило, неравновесна и значительно отличается от микроструктуры литых или деформированных аналогов, что напрямую определяет механические свойства сплава. Считается, что в процессе ЭЛАП высокотемпературная β-фаза претерпевает мартенситное $\beta \rightarrow \alpha'$ превращение, и впоследствии при выдержке при повышенных температурах за счет циклических нагревов, α' распадается на пластинчатую α/β структуру [2-4]. Однако, до конца пока не ясно, происходит ли сначала трансформация β-фазы диффузионным или бездиффузионным путем, поскольку высокая температура построения изделия близка к температуре начала мартенситного превращения ВТ6 [5]. Тем не менее, при превращениях $\beta \rightarrow \alpha + \beta$ и $\beta \rightarrow \alpha'$ пластины α/α' демонстрируют одинаковое ориентационное соотношение Бюргерса по отношению к исходной фазе [5]. Кроме того, специфические условия процесса и высокие температурные градиенты, в каждом конкретном случае АП, могут приводить к специфической микроструктуре Ti6Al4V: 1) образованию мартенситной α'-фазы; 2) образованию метастабильных фаз α'' и ω; 3) сегрегация Al из-за быстрого затвердевания и воздействие тепла при нанесении следующих слоев приводят к выделению интерметаллической фазы α_2; обогащению легирующими элементами (Al, V и т.д.) на межфазной границе.

Целью работы являлось установление влияния термоциклирования в условиях электронно-лучевого аддитивного производства на формирование структурно-фазового состояния и механических свойств титанового сплава Ti4Al3V. Для этой оценки впервые был использован экспериментальный подход, заключающийся в получении образцов, наплавленных с разным количеством слоев (1, 2, 10 и 150 слоев). Такой подход позволил отследить эволюцию структурно-фазового состояния в сплаве Ti4Al3V в условиях минимального и максимального термического воздействия.

Модельные образцы титанового сплава Ti4Al3V в виде вертикальных стенок, состоящих из 1, 2, 10 и 150 наплавленных слоев, были получены методом проволочного электронно-лучевого аддитивного производства на экспериментальной установке в ИФПМ

СО РАН (г. Томск). В качестве исходного материала использовалась титановая проволока ВТ6св диаметром 1,2 мм, следующего состава, вес. %: 5,4 % Al, 3,3 % V, Ti – остальное. Наплавку осуществляли на подложку из технически чистого титана марки ВТ1-0, закрепленную на водоохлаждаемом столе внутри вакуумной камеры. Процесс осуществляли при постоянном ускоряющем напряжении 30 кВ. Для того, чтобы избежать недостаточного нагрева или перегрева подаваемой проволоки значения тока электронного пучка варьировались по мере нанесения необходимого количества слоев [6].

Анализ влияния термоциклирования на структурно-фазовое состояние сплава Ti4Al3V в процессе ЭЛАП с использованием электронного пучка позволяет сформулировать ключевой тезис: характеристики сплава Ti4Al3V, полученного методом аддитивного производства с использованием электронного пучка, являются прямым следствием его термической истории. Эта история, определяемая сочетанием параметров процесса, непосредственно формирует микроструктуру, которая, в свою очередь, определяет конечные прочностные и пластические характеристики. В однослойном образце Ti4Al3V, характеризующимся наибольшим теплоотводом, формируется мартенситная структура внутри первичных зерен β-фазы и частицы α_2, выделяющиеся за счет сегрегации Al и его низкой растворимости в α-фазе с понижением температуры. Установлено, что при увеличении числа слоев изменяются механизмы фазовых превращений. В двухслойном образце Ti4Al3V более медленное охлаждение, связанное с термическим эффектом, приводит к формированию более крупной и грубой α' структуре по сравнению с однослойным образцом. В образце Ti4Al3V, наплавленном в 10 слоев, за счет повторных циклов нагрева происходит распад мартенсита $\alpha' \rightarrow \alpha + \beta$. Образец Ti4Al3V, наплавленный в 150 слоев, характеризуется зернограничной α-фазой, α/β ламелями и зонами термического влияния со структурами α/α'' и α/α_2. Показано, что увеличение количества слоев и соответственно термических циклов приводит к понижению значений предела прочности на 25%, но при этом значения относительного удлинения повышаются на 10 %. Выявлена эволюция параметра кристаллической решетки и текстуры, обусловленная релаксацией внутренних напряжений и перераспределением алюминия и ванадия между фазами в процессе послойной печати.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема FWRW-2024-0001.

Литература

1 А.В. Щербаков, Д.А. Гапонова, А.П. Слива, А.В. Гуденко, Р.В. Родякина, А.Л. Гончаров, В.П. Рубцов, В.К. Драгунов. Электронно-лучевая технология аддитивного формообразования с подачей присадочной проволоки. – М.: МЭИ, 2020. 196 с.

2 Y. Shi, S. Gong, H. Xu, G. Yang, J. Qiao, Z. Wang, J. Zhang, B. Qi. Electron beam metal additive manufacturing: Defects formation and in-process control. J. Manuf. Process., 2023, 101, 386–431.

3. X. Tan, Y. Kok, W. Q. Toh, Y. J. Tan, M. Descoins, D. Mangelinck, S. B. Tor, K. F. Leong, C. K. Chua. Revealing martensitic transformation and α/β interface evolution in electron beam melting three-dimensional-printed Ti-6Al-4V. Sci. Rep., 2016, 6, 26039.

4. C. de Formanoir, S. Michotte, O. Rigo, L. Germain, S. Godet. Electron beam melted Ti–6Al–4V: Microstructure, texture and mechanical behavior of the as-built and heat-treated material. Mater. Sci. Eng. A., 2016, 652, 105–119.

5. A.A. Antonysamy, J. Meyer, P.B. Prangnell. Effect of build geometry on the β-grain structure and texture in additive manufacture of Ti6Al4V by selective electron beam melting. Mater. Charact., 2013, 84, 153–168.

6. A. Zykova, A. Panfilov, A. Vorontsov, V. Shmakov, N. Savchenko, D. Gurianov, A. Gusarenko, V. Utyaganova, V. Krasnoveikin, and S. Tarasov. Microstructural and phase evolution of Ti6Al4V in electron beam wire additive manufacturing and on the subtransus quenching and normalization. Mater. Sci. Eng. A., 2024, 898, 146384.

КИНЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ТЕРМИЧЕСКОЙ ДЕСТРУКЦИИ НАНОКОМПОЗИТОВ PP/SiO_2 МЕТОДОМ КОУТСА–РЕДФЕРНА

Х.С. Ибрагимова

Институт физики Министерства Науки и Образования Азербайджанской Республики, Баку
Hicran90@rambler.ru

Полимерные композиционные материалы широко применяются в различных отраслях промышленности благодаря сочетанию малой плотности, высокой технологичности и хороших эксплуатационных характеристик. Особый интерес представляют полимерные нанокомпозиты, содержащие нанодисперсные наполнители, которые позволяют существенно улучшить механические, термические и барьерные свойства материалов без значительного увеличения их массы[1]. Полипропилен (PP) является одним из наиболее распространённых термопластичных полимеров и широко используется в автомобильной промышленности, строительстве, упаковочной индустрии и электротехнике. Однако относительно невысокая термическая устойчивость ограничивает область его применения при повышенных температурах. Одним из эффективных способов повышения термостойкости полипропилена является введение наночастиц диоксида кремния (SiO_2), которые способны изменять кинетику процессов термической деструкции и повышать устойчивость полимерной матрицы к термоокислительному воздействию[2]. В данной работе исследованы особенности термической деструкции изотактического полипропилена (PP) и нанокомпозитов PP/SiO_2 различного состава с использованием термогравиметрического анализа (ТГА) и кинетического метода Коутса–Редферна. Анализ кривых ТГА и ДТГ показал, что термическая деструкция изотактического полипропилена протекает в три основные стадии. Первая стадия наблюдается при температурах ниже 623 К и характеризуется незначительной потерей массы. В этом диапазоне структура полимера сохраняет стабильность, а степень превращения составляет α=0–0,02. Вторая стадия протекает в интервале 623–753 К и сопровождается интенсивным разрывом макромолекулярных цепей полимера. На данной стадии наблюдается основной максимум на ДТГ-кривой, а степень превращения изменяется в пределах α=0,6–0,8. Третья стадия начинается при температурах выше 753 К, когда скорость деструкции постепенно уменьшается вследствие разложения остаточных продуктов и процессов карбонизации.

Кинетические параметры процесса были определены методом Коутса–Редферна[3] Рассчитаны энергия активации (Ea) и предэкспоненциальный множитель (A). Установлено, что введение наночастиц SiO_2 способствует повышению термической стабильности полипропилена. Максимальное значение энергии активации получено для нанокомпозита PP+5%SiO_2 и составило 236 кДж/моль, тогда как для чистого PP этот параметр равен 180 кДж/моль. Повышение энергии активации связано с ограничением подвижности макромолекулярных цепей и снижением скорости распространения свободнорадикальных процессов. При содержании SiO_2 10% наблюдается снижение энергии активации вследствие агломерации наночастиц и ухудшения их распределения в полимерной матрице. Полученные результаты свидетельствуют о том, что оптимальное содержание SiO_2 обеспечивает существенное повышение термической устойчивости полипропиленовых нанокомпозитов.

Литература

1. Li H., Cheng B. Recent research progress and advanced applications of silica/polymer nanocomposites. Nanotechnology Reviews, 2022, 11(1) 2928-2964.
2. E. Velásquez Developing Post-Consumer Recycled Flexible Polypropylene and Fumed Silica-Based Nanocomposites with Improved Processability and Thermal Stability. Polymers, 2023, 15(5) 1142.
3. A.W. Coats, J.P. Redfern, Kinetic parameters from thermogravimetric data. Nature, 1964, 201 68-69.

ВЛИЯНИЕ КОМПЛЕКСНОГО ЛЕГИРОВАНИЯ, ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ КОВКИ И ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА МИКРОСТРУКТУРУ, МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И СОПРОТИВЛЕНИЕ ОКИСЛЕНИЮ ИНТЕРМЕТАЛЛИДНЫХ ОРТО-СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ Ti_2AlNb

В.М. Имаев, Д.М. Трофимов, А.А. Ганеев, Р.Р. Тимиряев, Р.И. Зайнуллин, М.Р. Шагиев, Р.Р. Мулюков

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
vimayev@mail.ru

Интерметаллидные сплавы на основе орторомбической O-Ti_2AlNb фазы, открытые в начале 1990-х годов, благодаря небольшому удельному весу (5.2-5.4 г/см^3) и существенно повышенной в сравнении с титановыми сплавами жаропрочности и жаростойкости, могут быть использованы в качестве конструкционных материалов в перспективных газотурбинных двигателях и наземных энергетических установках. Считается, что наилучшей комбинацией механических свойств обладают сплавы второго поколения, содержащие не менее 25 ат.% Nb, на основе Ti-(22-25)Al-(25-27)Nb (ат. %), а оптимальным фазовым составом является двухфазный состав O(Ti_2AlNb) + β/B2, где β/B2 – разупорядоченная/упорядоченная ОЦК-фаза. Орто-сплавы легируют такими элементами, как Mo, W, V, Zr, Ta, Si, что способствует повышению их механических свойств. Между тем, несмотря на значительные усилия, потраченные к настоящему времени на разработку орто-сплавов и связанных с ними технологий, эти сплавы так и не нашли широкого применения. Практическому внедрению препятствуют:

- недостаточная жаростойкость (сопротивление окислению) и жаропрочность сплава при потенциальных температурах эксплуатации (600-750°C);
- сложность структурно-фазовых превращений и управления микроструктурой;
- недостаточное понимание роли легирующих элементов;
- ограниченная пластичность, затрудняющая проведение деформационной обработки.

Для решения указанных проблем в настоящей работе предложены новые физико-химические принципы легирования сплавов данного класса, основанные на учете соотношения алюминиевого и ниобиевого эквивалентов ($Al_{экв}/Nb_{экв}$) для стабилизации двухфазного O+β/B2 фазового состава, и идее комплексного легирования. Предложены следующие физико-химические подходы к легированию орто-сплавов, ранее в совокупности не применявшиеся:

i) соотношение $Al_{экв}/Nb_{экв}$ при легировании должно примерно соответствовать тройному сплаву состава Ti-(22-25)Al-(25-27)Nb (ат.%), чтобы обеспечить двухфазный состав сплава;

ii) предпочтительно, чтобы легирующие элементы относились к тугоплавким металлам и имели бóльший атомный радиус, чем Nb, Ti и Al, так как первое способствует повышению жаропрочности и жаростойкости (через замедление диффузии), а второе – прочности и жаропрочности (через твердорастворное упрочнение);

iii) легирующие элементы должны иметь хорошую растворимость в фазах O(Ti_2AlNb) и β/B2, исключающую образование дополнительных фаз, включая хрупкую интерметаллидную фазу α_2(Ti_3Al);

iv) чтобы повысить сопротивление окислению, предпочтительно повышенное содержание Al (в диапазоне 22-25 ат.%);

v) орто-сплав должен быть микролегирован кремнием (для дисперсионного упрочнения и повышения жаростойкости);

vi) разница в электроотрицательности легирующих элементов и базовых элементов сплава (Ti, Nb и Al) не должна быть значительной, чтобы избежать увеличения степени ионности межатомной связи, что может снизить пластичность сплава.

Исходя из вышесказанного, цель настоящей работы – разработка нового комплексно легированного орто-сплава для потенциального применения в качестве конструкционного материала при температурах до 700°C и выше. Соотношение алюминиевого и ниобиевого эквивалентов $Al_{экв}/Nb_{экв}$ варьировалось в зависимости от легирования, но оставалось в диапазоне, соответствующем тройным сплавам состава Ti-(22-25)Al-(25-27)Nb (ат.%). Комплексное легирование было нацелено на существенное повышение жаростойкости и жаропрочности орто-сплава (в сравнении с указанными тройными сплавами) при сохранении приемлемого уровня пластичности.

В соответствии с указанными подходами, в настоящей работе были выплавлены 4 комплексно легированных сплава составов Ti-22Al-21Nb-5.5(Zr,Mo,Ta,Sn,Hf)-0.3Si-0.15B, Ti-25Al-21Nb-5.5(Zr,Mo,Ta,Sn,Hf)-0.3Si-0.15B, Ti-23.5Al-23Nb-4(Zr,Mo,Ta,Hf)-0.3Si и Ti-23Al-25.5Nb-2.5(Mo,Zr)-0.3Si, а также референтный сплав состава Ti-22Al-25Nb-0.15B (ат.%) в виде модельных слитков с примерным размером Ø45×16 мм. Пониженное содержание Nb в трех исследованных сплавах компенсировалось за счет легирования. Рентгеноструктурный, калориметрический (ДСК) анализ, а также эксперимент по окислению образцов сплавов проводили на литом состоянии, подвергнутом отжигу, а механические испытания на растяжение и ползучесть – после изотермической ковки и термической обработки. Сопротивление окислению оценивали по удельному привесу образцов при длительном выдерживании на воздухе при 700°C в течение 1000 часов.

Рентгеноструктурные и электронно-микроскопические исследования показали, что сплавы с содержанием 22-23.5 ат.% Al имеют требуемую двухфазную O+β/B2 структуру, в то время как сплав с 25 ат.% Al имеет почти однофазную структуру с минимальной объемной долей (<1%) β/B2-фазы. Поскольку однофазный O-сплав хрупок, механические свойства сплава Ti-25Al-21Nb-5.5(Zr,Mo,Ta,Sn,Hf)-0.3Si-0.15B не изучали. Хрупкая $\alpha_2(Ti_3Al)$ фаза в сплавах не обнаружилась, что указывает на эффективность учета при легировании соотношения $Al_{экв}/Nb_{экв}$. С помощью ДСК-анализа для всех составов была определена единая последовательность равновесных фазовых превращений при охлаждении: $L \rightarrow \beta/B2 \rightarrow \beta/B2+\alpha_2(Ti_3Al) \rightarrow \beta/B2+\alpha_2(Ti_3Al)+O(Ti_2AlNb) \rightarrow O(Ti_2AlNb)+\beta/B2$.

Изучение кинетики окисления при 700°C показало, что комплексное легирование в сочетании с повышенным содержанием Al и снижением объемной доли β/B2-фазы существенно повышает жаростойкость. На рисунке 1а представлены кинетические кривые привеса массы образцов исследуемых орто-сплавов, полученные в результате выдержки при 700°C в течение 1000 часов. В частности, привес массы образца сплава Ti-23.5Al-23Nb-4(Zr,Mo,Ta,Hf)-0.3Si в процессе окисления при 700°C/1000 ч оказался минимальным среди исследованных двухфазных сплавов (около 0.8 мг/см^2) (Рис. 1а). Исследование механических свойств сплавов показало, что наиболее сбалансированными свойствами обладает комплексно легированный сплав состава Ti-23.5Al-23Nb-4(Zr,Mo,Ta,Hf)-0.3Si (ат.%). При этом обнаружено, что введение Sn (имеющего самую большую разницу в электроотрицательности в сравнении с базовыми элементами среди легирующих элементов), замещающего Al, приводит к снижению пластичности сплава, а микролегирование бором неэффективно для измельчения литого β-зерна, что обусловило исключение этих элементов из комплексного легирования.

Для сплава оптимального состава была выполнена оценка влияния различных режимов термической обработки деформированных полуфабрикатов на механические свойства. Наиболее сбалансированные механические свойства достигаются после термической обработки, включавшей в себя отжиг в однофазной β/B2 области с последующим медленным охлаждением в печи и старением. В данном структурном состоянии сплав показал предел прочности при комнатной температуре σ_B=1071 МПа при пластичности δ=1.7%, при 700°C — σ_B=915 МПа и δ=3.3%, длительная прочность при 700°C/340 МПа составила 174 ч. После термической обработки, включавшей в себя отжиг в однофазной β/B2 области с последующим охлаждением на воздухе и старением, минимальная скорость ползучести при 700°C/340 и 360 МПа для образцов сплава

оптимизированного состава оказалась более чем на порядок ниже, чем в референтном сплаве после аналогичной деформационно-термической обработки, а длительная прочность после испытания при 700°C/340 МПа составила 149.3 ч против 24.2 ч в случае референтного сплава (Рис. 1б) несмотря на близость полученных микроструктурных состояний сплавов. Микроструктурное исследование образцов после испытаний на ползучесть показало, что существенное повышение сопротивления ползучести и длительной прочности при комплексном легировании обусловлено повышением микроструктурной стабильности сплава (затрудненностью рекристаллизации и фазовых превращений, связанных с β/B2 фазой). Изучение влияния разных режимов термической обработки для сплава оптимизированного состава позволило также выявить режим, обеспечивающий повышенную пластичность и прочность при комнатной температуре (δ≈7% и σ_B≈1200 МПа), при некотором снижении сопротивления ползучести.

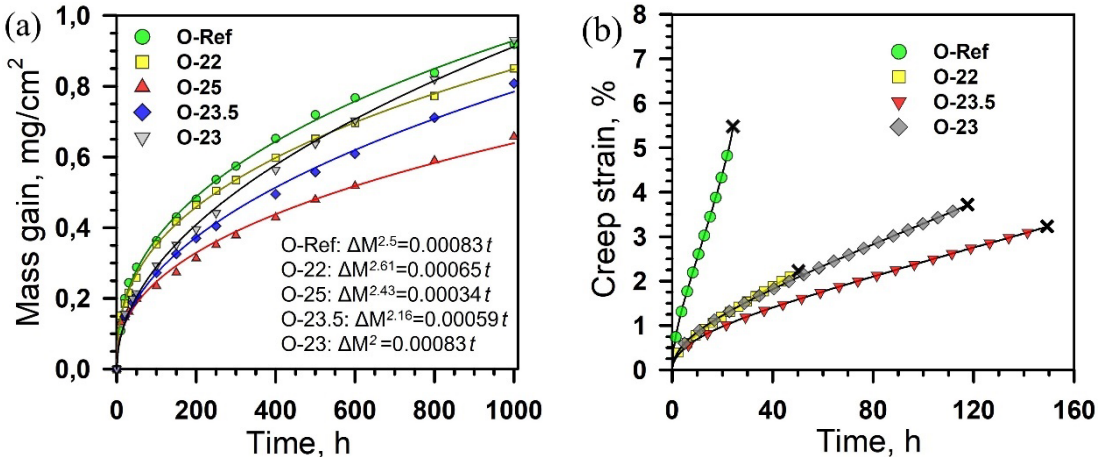


Рис. 1. Кинетические кривые привеса массы образцов исследуемых орто-сплавов, полученные в результате выдержки при 700°C/1000 ч, а также кривые ползучести образцов сплавов, испытанных при 700°C/340 МПа. Наиболее значительный положительный эффект комплексного легирования был получен при испытаниях на ползучесть.

Наблюдаемый синергетический эффект многокомпонентного легирования обусловлен атомными и структурными факторами. Присутствие тугоплавких элементов Mo, Ta, Hf, замещающих атомы Ti, замедляет объемную самодиффузию в β/B2-фазе и пластинах O-фазы, что способствует повышению термической стабильности микроструктуры и сопротивления окислению при длительной выдержке. Легирование Zr и Hf, обладающих увеличенными атомными радиусами в сравнении с Ti и Nb, способствует твердорастворному упрочнению, а микролегирование Si ведет к образованию силицидов, что снижает подвижность дислокаций при высокотемпературном нагружении. По достигнутому уровню жаропрочности и жаростойкости (сопротивления окислению) разработанный сплав состава Ti-23.5Al-23Nb-4(Zr,Mo,Ta,Hf)-0.3Si (ат.%) превосходит все известные сплавы на основе O-Ti_2AlNb фазы и приближается к интерметаллидным γ-TiAl сплавам с дуплексной структурой. Это создает предпосылки для применения разработанного сплава в качестве материала турбинных лопаток и других узлов газотурбинных двигателей, работающих при температурах до 700°C.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в форме гранта на проведение совместно с иностранными организациями научных исследований по программе двух- и многостороннего научно-технологического взаимодействия, контракт ИПСМ РАН №13.2251.21.0285. Экспериментальные исследования были выполнены на базе Центра коллективного пользования научным оборудованием ИПСМ РАН.

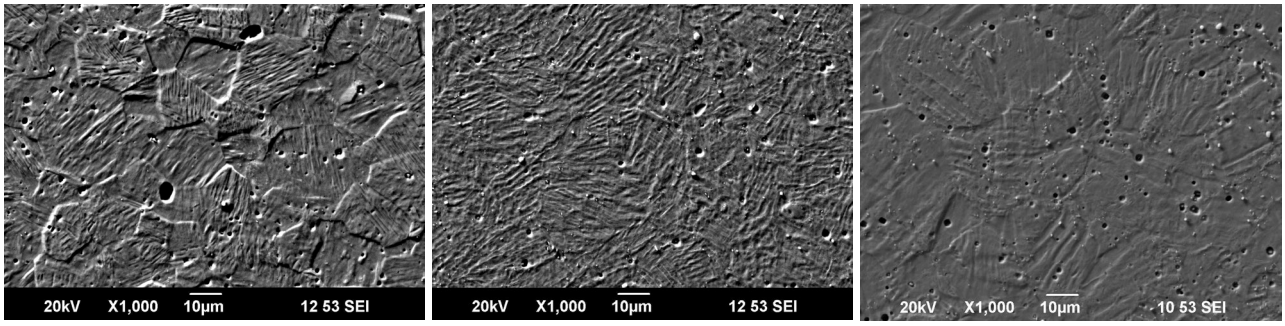
АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ БИОЛОГИЧЕСКИХ СРЕД НА КОРРОЗИОННУЮ СТОЙКОСТЬ СПЛАВА TINI

Э.И. Исхакова[1, 2], А.А. Чуракова[1, 2]

[1]*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, Уфа*
[2]*Уфимский университет науки и технологий, г.Уфа, Россия*
elmira.iskhakova.74@mail.ru

Никелид титана (TiNi, нитинол) является одним из наиболее востребованных материалов благодаря эффекту памяти формы и сверхэластичности [1-2], однако его длительная эксплуатация в организме требует высокой коррозионной стойкости, так как высвобождение ионов никеля может вызывать токсические и аллергические реакции [3-4]. Ключевым фактором, определяющим коррозионное поведение, является пассивный оксидный слой на основе TiO_2 [5], свойства которого зависят от состава среды и состояния поверхности. Установлено, что хлорид-ионы являются основным агрессивным агентом, провоцирующим питтинговую коррозию нитинола [6]. В то же время фосфат-ионы, присутствующие в ряде физиологических сред (раствор Хэнкса, искусственная плазма), могут оказывать ингибирующее действие, стабилизируя пассивную оксидную плёнку за счёт адсорбции на поверхности [7]. Переход к ультрамелкозернистому состоянию может как повысить, так и снизить коррозионную стойкость нитинола, поскольку высокая плотность границ зёрен создаёт дополнительные пути для диффузии ионов, но одновременно способствует формированию более однородного оксида. Именно поэтому представляет интерес сравнительное исследование коррозионного поведения крупнозернистого и ультрамелкозернистого нитинола в различных биологических средах для выявления микроструктурных факторов, определяющих долговременную надёжность имплантатов.

Данная работа посвящена исследованию сплава с большим содержанием никеля относительно стехиометрии – $Ti_{49,6}Ni_{50,4}$. Крупнозернистое (КЗ) состояние (рис 1а) получали путем закалки из области гомогенности (Т=800°С, 1 час) в воду. Ультрамелкозернистое (УМЗ) состояние формировали двумя способами: равноканальным угловым прессованием (РКУП) при температуре 450°С по маршруту Вс с числом проходов n=4 (рис 1б), а также прокаткой-волочением (при Т=500°С и Т=300°С соответственно (рис 1в)). Для всех состояний проводили дополнительный отжиг при температуре 430°С (температура старения) в течение 1 часа. Затем образцы выдерживали в течение 30 суток в коррозионных растворах, имитирующих биологическую среду организма: растворе Рингера, 0,9% NaCl, растворе Хэнкса, искусственной плазме крови и слюне.



а б в

Рис. 1. Микроструктура сплава $Ti_{49,6}Ni_{50,4}$: (а) КЗ (закалка), (б) УМЗ (РКУП), (в) УМЗ (прокатка-волочение)

Комплексное исследование включало микроструктурный анализ (оптическая и электронная микроскопия), рентгенофазовый анализ, оценку механических свойств и качественные реакции (полуколичественный метод) на выход ионов Ti^{4+} и Ni^{2+}.

Во всех образцах обнаружена оксидная плёнка TiO_2, а также поверхностные соединения (оксиды, гидроксиды, фосфаты). Скорость коррозии по изменению массы оказалась минимальной для всех состояний. При этом выявлена чёткая корреляция между структурным состоянием и ионным высвобождением: в УМЗ-образцах, полученных прокаткой-волочением, полностью отсутствует выход ионов Ti^{4+} и Ni^{2+}, тогда как КЗ-образцы и УМЗ после РКУП показывают небольшое выделение никеля.

Литература

1. Miyazaki S., Kim H.Y., Hosoda H. Development and characterization of Ni-free Ti-based shape memory and superelastic alloys. Materials Science and Engineering: A, 2006, 438–440, 18–24. DOI: 10.1016/j.msea.2006.02.054.
2. Huang W.M., Ding Z., Wang C.C., Wei J., Zhao Y., Purnawali H. Shape memory materials. Materials Today, 2010, 13(7-8), 54-61. https://doi.org/10.1016/S1369-7021(10)70128-0.
3. Haider W., Munroe N., Tek V., Gill P.K., Tang Y., McGoron A.J. Cytotoxicity of Metal Ions Released from Nitinol Alloys on Endothelial Cells. J Mater Eng Perform, 2011, 20(4), 816-818. DOI: 10.1007/s11665-011-9884-5.
4. Li X.J., Wang J.Q., Han E.H., Ke W. Influence of fluoride and chloride on corrosion behavior of NiTi orthodontic wires. Acta Biomaterialia, 2007, 3(5), 807-815. https://doi.org/10.1016/j.actbio.2007.02.002.
5. Shabalovskaya S.A., Anderegg J., Van Humbeeck J. Critical overview of Nitinol surfaces and their modifications for medical applications. Acta Biomaterialia, 2008, 4(3), 447–467.
6. Hu T., Chu C., Xin Y. et al. Corrosion products and mechanism on NiTi shape memory alloy in physiological environment. Journal of Materials Research, 2010, 25, 350–358. https://doi.org/10.1557/JMR.2010.0051.
7. Fekry A.M., Filippova I.V., Medany S.S., Abdel-Gawad S.A., Filippov L.O. Use of a natural rock material as a precursor to inhibit corrosion of Ti alloy in an aggressive phosphoric acid medium. Sci Rep, 2024, 14(1), 9807. DOI: 10.1038/s41598-024-60403-0.

СРАВНЕНИЕ СВАРКИ И ОБРАБОТКИ ТРЕНИЕМ С ПЕРЕМЕШИВАНИЕМ АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА АМг3

Д.Б. Кабирова[1], Н.Ф. Хайретдинов[1], Р. Ф. Фазлыахметов[1], М.Ф. Имаев[2],

[1]Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
[2]Уфимский государственный нефтяной технический университет, г. Уфа
dilara@imsp.ru

Алюминиевые сплавы, в частности системы Al-Mg (серия 5xxx), к которой относится сплав АМг3, широко применяют в машиностроении, судостроении, авиационной и транспортной промышленности благодаря высокому соотношению прочности к весу, отличной коррозионной стойкости и хорошей свариваемости. Однако традиционные методы сварки плавлением (полуавтоматическая и аргонодуговая) сопряжены с рядом проблем: склонностью к образованию пористости из-за высокой растворимости водорода в жидком алюминии, образованием горячих трещин и значительным снижением прочности в зоне термического влияния. Это обуславливает острую потребность в разработке альтернативных технологий соединения. Перспективным решением является применение сварки трением с перемешиванием (СТП), позволяющим получать неразъёмные соединения в твёрдой фазе. Важно различать два направления этой технологии, схожих по техническому исполнению, но различных по назначению и характеру структурных превращений: СТП и обработку трением с перемешиванием (ОТП).

При СТП тепло, генерируемое за счёт трения, вызывает локальное размягчение материала до пластичного состояния, не достигая температуры плавления. Под действием механического перемешивания и интенсивной пластической деформации происходит трансформация материала в зоне контакта, что обеспечивает формирование монолитного соединения. Технология позволяет эффективно сваривать алюминиевые пластины толщиной от 0,5 до 65 мм без использования защитного газа или присадочной проволоки.

ОТП использует тот же инструмент и базовый принцип генерации тепла за счет трения. Однако вместо соединения двух деталей инструмент перемещается по поверхности цельной заготовки. Целью ОТП является гомогенизация микроструктуры, измельчение зерна и вторичных фаз. В результате интенсивной пластической деформации и динамической рекристаллизации формируется ультрамелкозернистая структура, что приводит к повышению механических свойств зоны обработки. Таким образом, если СТП решает задачу создания неразъемного соединения, то ОТП направлена на локальное улучшение физико-механических свойств материала.

Целью данной работы являлось исследования и сопоставление прочностных характеристик сварного шва (СТП) и упрочнённого поверхностного слоя (ОТП) для выявления вклада сварки трением с перемешиванием и обработки трением с перемешиванием в формирование свойств сварного соединения при СТП.

В качестве объекта исследования были выбраны пластины алюминиевого сплава АМг3 толщиной 1,2 мм. Химический состав сплава представлен в таблице 1.

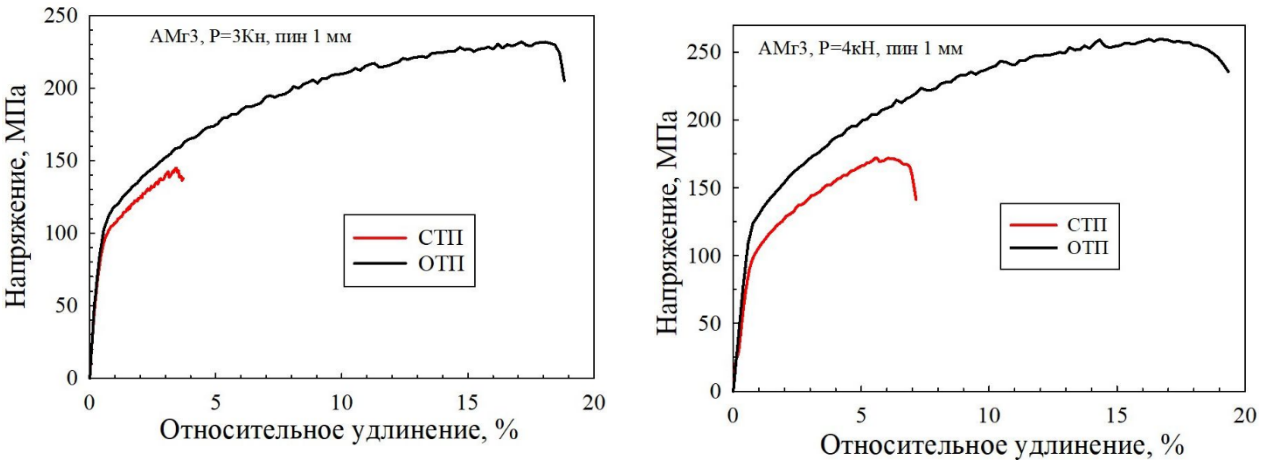
Таблица 1. Химический состав сплава АМг3

Сплав	Si	Fe	Cu	Mn	Mg	Cr	Zn	Ti	Al
АМг3(1530)	0,5-0,8	0,5	0,1	0,3-0,6	3,2-3,8	0,05	0,2	0,1	остальное

СТП и ОТП проводили с использованием инструментов из высокохромистой легированной стали с пином длиной 0,8 и 1,0 мм в форме штифта с резьбой. Скорость вращения инструмента составляла 1000 об/мин, скорость поступательного движения 30 мм/мин, осевое усилие 3 и 4 кН. Испытания на статическое растяжение проводили на

универсальной разрывной машине Instron-5982 при комнатной температуре. Образцы имели длину рабочей части 15 см и были вырезаны перпендикулярно сварному шву или направлению обработки. Определяли условный предел текучести ($\sigma_{0.2}$), предел прочности ($\sigma_в$) и относительное удлинение (δ). Микроструктуру полированных поперечных шлифов после СТП и ОТП, а также фрактографические исследования излома после механических испытаний проводили на растровом электронном микроскопе Tescan Mira.

Исследование микроструктуры показало, что при всех режимах СТП полностью сформировалось соединение. Участков непровара в корне шва не обнаружено. Механические испытания показали, что основной металл имел предел прочности ~223 МПа и пластичность чуть более 20%. Образцы, полученные методом ОТП, показали в среднем ~235 МПа (~105% от прочности основного металла) и достаточно неплохую пластичность ~19%. Образцы, полученные СТП, демонстрировали более низкие механические свойства, чем ОТП: пластичность не превышала 4-7%, предел прочности в среднем ~130 МПа (~56% от прочности основного металла). Эта тенденция является общей для всех исследованных режимов (рис. 1).



а б

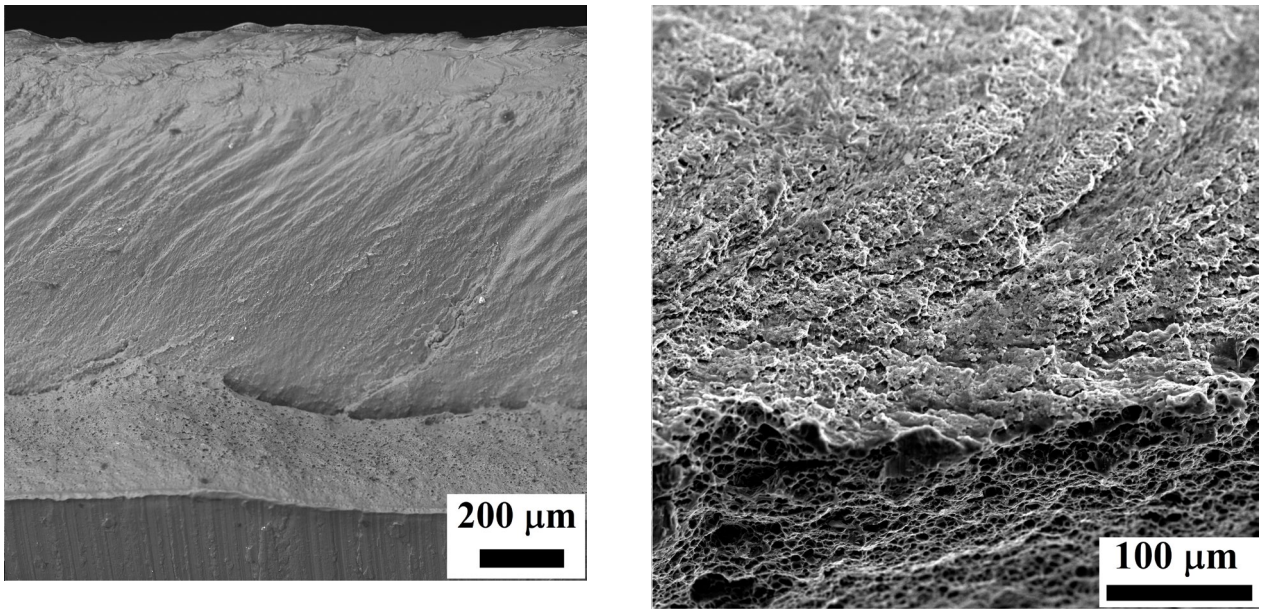
Рис. 1. Результаты испытаний на растяжение образцов после СТП и ОТП с пином длиной 1 мм и при осевом усилии а) 3 кН и б) 4 кН

Низкую пластичность после СТП можно объяснить следующим образом. На поверхности заготовок всегда присутствует пленка оксида алюминия. При СТП происходит перемешивание материала двух заготовок, и фрагменты пленки оксида алюминия, находящиеся на кромках листов, попадают внутрь сварного соединения, образуя протяженный дефект, называемый в литературе «kiss band». По-видимому, именно такой дефект разупрочняет сварное соединение. При ОТП количество, внедренного в зону обработки оксида алюминия существенно меньше, что обеспечивает более высокие механические свойства.

На рис. 2 показан излом СТП образца после испытания на растяжение, где видны две области разрушения. В нижней части образца (корень сварного шва) присутствует полоса начала разрушения, вызванного, по-видимому, наличием kiss band и зоной долома в верхней части образца.

Таким образом, несмотря на применение одних тех же режимов обработки образцы из сплава АМг3, полученные СТП, показывают значительно более низкую пластичность, чем после ОТП. Причина этого может быть связана с попаданием в зону соединения фрагментов окисной пленки, находящейся на соединяемых кромках листов. Планируется провести более тонкое исследование в РЭМ с целью обнаружения следов kiss band. Для увеличения

пластичности СТП образцов требуется более качественная подготовка кромок, а также оптимизация режима сварки и сварочного инструмента.



а б

Рис.2. Излом образца сплава АМг3 после СТП (усилие сварки 4кН, длина пина 0,8 мм) и механических испытаний, снятый при различных увеличениях

Литература

1. Muhsin J. Jweeg, Ayad M. Takhakh, Nawzad K. Kareem. Comparison between friction stir welding (FSW) and friction stir processing (FSP) of AA5086 aluminium alloy. Int. J. Tech. Res. Applications, 2015, 3(6) 205-210.
2. S. Vignesh. Comparison of Friction Stir Welding and Friction Stir Processing Using Aluminium Alloy 6061 and Aluminium Alloy 6063. International Conference on Intelligent Computing and Systems. 2017.

МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЕ И ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА $Ni_{37}Co_{13}Mn_{35}Ti_{15}$ В ВИДЕ СЛИТКОВ И БЫСТРОЗАКАЛЁННЫХ ЛЕНТ

А.П. Каманцев[1], В.С. Калашников[1], А.В. Несолёнов[1], А.С. Кузнецов[1], О.Е. Ковалёв[2], Н.Ю. Ныркова[2], Р.А. Сафонов[2], А.В. Головчан[2], И.И. Мусабиров[3]

[1]*Институт радиотехники и электроники им. В.А.Котельникова РАН, Москва*
[2]*ФГБНУ Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина, Донецк*
[3]*Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа*
kaman4@gmail.com

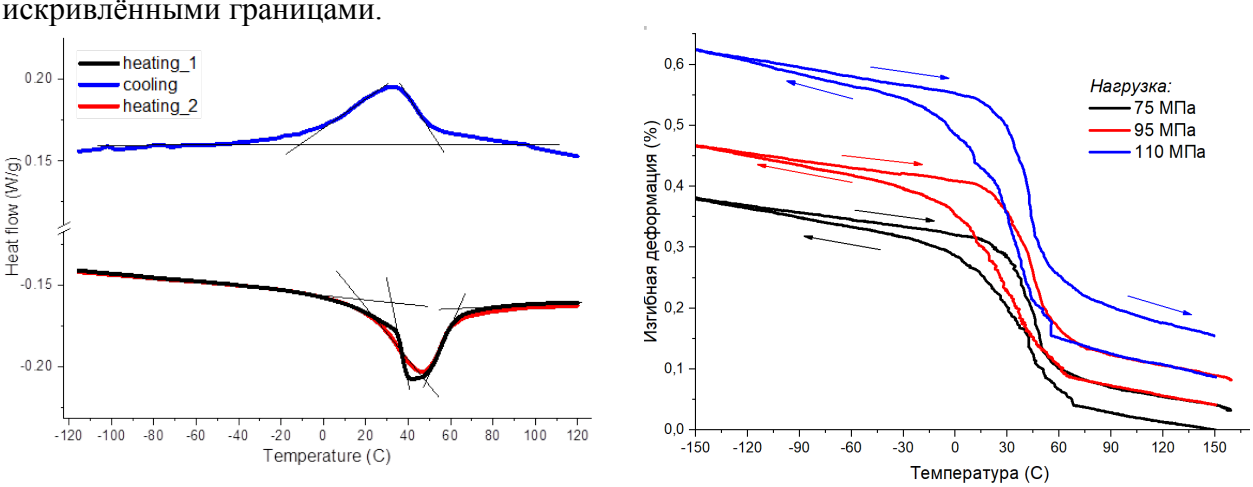
В последнее время внимание исследователей приковано к изучению свойств сплавов Гейслера, состоящих только переходные 3*d*-металлы. В работах [1, 2] впервые было продемонстрировано, что в материалах системы Ni-Co-Mn-Ti происходит термоупругое мартенситное превращение первого рода, которое сопровождается изменением магнитного упорядочения из ферромагнитного в состояние с низкой намагниченностью. Подобные фазовые переходы (ФП) наблюдаются, например, в хорошо изученных сплавах Ni-Mn-Z (Z= In, Sn), однако было показано [3], что постпереходные металлы и интенсивная *p-d* ковалентная гибридизация ухудшают прочностные характеристики таких соединений. Главным функциональным отличием сплавов Гейслера из 3*d*-металлов является их высокая механическая стабильность при термоциклировании ФП 1-го рода и при циклическом воздействии сильных внешних механических напряжений и магнитных полей.

Слиток сплава $Ni_{37}Co_{13}Mn_{35}Ti_{15}$ выплавлен методом дуговой плавки из материалов высокой чистоты в атмосфере аргона. Проведённые исследования методом дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) на образце термообработанного (отжиг при 900 С в течение 96 часов с закалкой в жидкий азот) сплава Гейслера $Ni_{37}Co_{13}Mn_{35}Ti_{15}$ массой 27,88 мг показали наличие метамагнитоструктурного ФП 1-го рода с характерными температурами: при охлаждении M_S = 55 С, M_F = -12 С, а при нагреве A_S = 17 С, A_F = 64 С. Скрытая теплота ФП составила 7,4 Дж/г и 8,66 Дж/г при охлаждении и нагреве, соответственно (Рис 1а).

Методика исследования эффекта памяти формы (ЭПФ) и относительной деформации образцов основана на методе трехточечного изгиба. Для проведения испытаний применяется уникальная установка специализированной конструкции, предназначенная для прецизионного измерения зависимости изгибной деформации ε от температуры Т и приложенных напряжений σ, что позволяет определить: характеристические температуры начала и конца мартенситных превращений (As, Af, Ms, Mf); величину обратимой деформации ε_r. На Рис. 1б представлены температурные зависимости изгибной деформации образца сплава Гейслера $Ni_{37}Co_{13}Mn_{35}Ti_{15}$ при механических нагрузках 75, 95, 110 МПа. На кривых зависимости изгибной деформации ε от Т при различных σ для образцов Ni-Co-Mn-Ti виден термоупругий мартенситный ФП. Температуры ФП хорошо совпадают с данными ДСК. По результатам исследования установлено, что образцы обладают ЭПФ в интервале от 15 до 90 С при относительно высокой для этой группы сплавов обратимой деформацией - 0,3 %.

Исследованы ленты из сплава Гейслера $Ni_{37}Co_{13}Mn_{35}Ti_{15}$, полученные методом спиннингования при различных скоростях барабана 10-40 м/с. Образцы лент исследовались методами сканирующей электронной микроскопии (СЭМ), они представляют собой композицию «нитеподобных волокон», хрупко разрушающиеся по местам их сопряжения. СЭМ исследования зёренной микроструктуры показали следующее. Структура области, прилегающая к барабану, после спининнгования состоит из наноразмерных зерен от 100 до 1000 нм, довольно правильной, равноосной формы (Рис 2а). Обратная сторона имеет аналогичную структуру, при этом в некоторых зернах наблюдается полосчатый

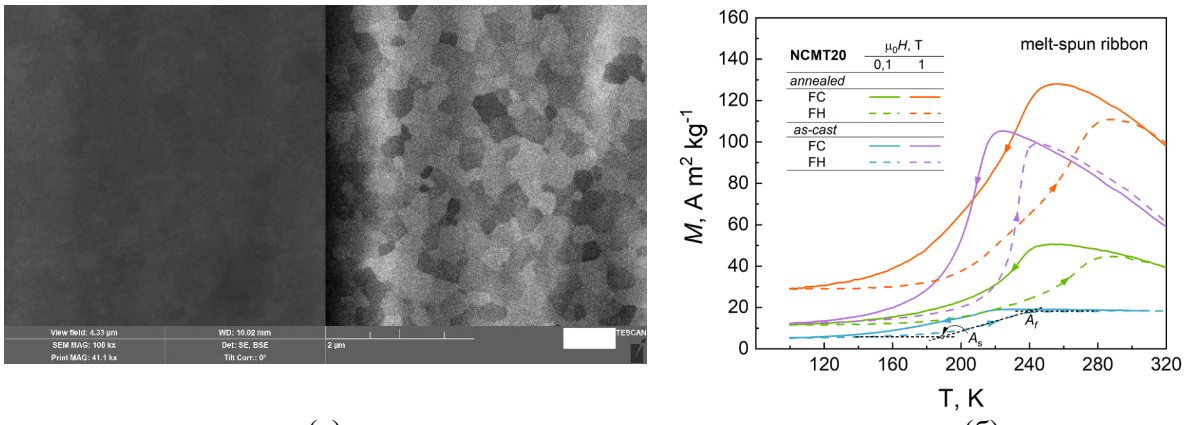
периодический контраст, с шириной порядка десяти нанометров с когерентными, но искривлёнными границами.



(а) (б)

Рис. 1. (а) Результаты ДСК исследований термообработанного сплава Гейслера $Ni_{37}Co_{13}Mn_{35}Ti_{15}$ в области ФП 1-го рода. (б) Температурные зависимости изгибной деформации ε от при различных механических нагрузках σ для термообработанного сплава Гейслера $Ni_{37}Co_{13}Mn_{35}Ti_{15}$ в области ФП 1-го рода.

Часть синтезированных лент подвергалась термической обработке при температуре 1125 K в течение 15 мин. с последующей закалкой в ледяной воде. Исследования магнитных свойств образцов лент в исходном и отожженном состоянии осуществлялись на вибрационном магнитометре в диапазоне температур от 100 до 320 K по протоколам FC и FH в магнитных полях 0,1 и 1 Тл (Рис. 2б). Определена чувствительность температуры ФП к магнитному полю dT/dH = 2 K/Тл для отожженных, против dT/dH = 2,69 K/Тл для исходных образцов. Выполнена оценка изменения энтропии ΔS_t при ФП 1-го рода, значения которой при ФП в магнитном поле 1 Тл составили 40,7 Дж/(кг K) и 43,6 Дж/(кг K), что хорошо согласуется с литературными сведениями для систем Ni-Co-Mn-Ti.



(а) (б)

Рис. 2. (а) СЭМ изображения микроструктуры ленты в режимах SE и BSE со стороны, прилегающей к барабану. (б) Температурные зависимости намагниченности $M(T)$ для лент в литом состоянии и после отжига, измеренные в магнитных полях 0,1 и 1 Тл.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-19-00942, https://rscf.ru/project/25-19-00942/

Литература

1. Z.Y. Wei, et al. Appl. Phys. Lett., 2015, 107, 022406.
2. Z.Y. Wei, et al. Appl. Phys. Lett., 2016, 109, 071904.
3. W. Everhart, J. Newkir. Heliyon, 2019, 5, e01578.

ВЛИЯНИЕ ЧАСТИЦ КАРБИДА ТИТАНА НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА МЕТАЛЛОМАТРИЧНЫХ КОМПОЗИТОВ СИСТЕМ В95-TiC И АМг5-TiC

В.С. Канакин, А.С. Смирнов, В.П. Швейкин

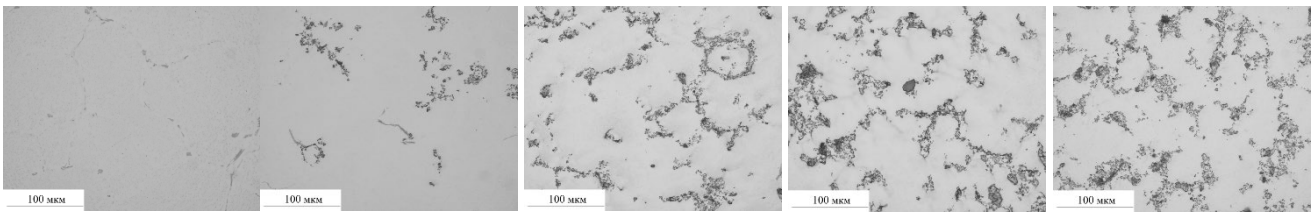
Институт машиноведения имени Э.С. Горкунова УрО РАН, Екатеринбург
kanakin.v.s@gmail.com

Постоянно возрастающие требования к материалам и конструкциям в современных отраслях промышленности диктуют необходимость разработки новых конструкционных материалов. В связи с этим перспективным направлением является создание дисперсно-упрочненных композитов на основе промышленных алюминиевых сплавов, что позволяет улучшить их удельные свойства и использовать композиты для замены сплавов с сохранением традиционных методов обработки металлов. В качестве упрочняющих частиц часто используются SiC, Al_2O_3, TiB_2 и многие другие. Однако значительно меньшее количество работ посвящено композитам, упрочненным карбидом титана (TiC) несмотря на то, что TiC обладает относительно высокой долей металлической связи и тем же типом кристаллической решетки, что и алюминий. Введение упрочняющих частиц неизбежно приводит к модификации структуры материала, что напрямую отражается на его свойствах. Для достижения требуемого уровня механических свойств применяется термодеформационное воздействие, позволяющее целенаправленно изменять структуру материала. Поскольку экспериментальным путем зачастую не удается выявить достоверные закономерности эволюции структуры от условий термодеформационного воздействия ввиду сложного характера процессов в композитах и высоколегированных сплавах, то перспективным инструментом для построения этих зависимостей является нейросетевое моделирование. Таким образом, целью данной работы является исследование влияния частиц карбида титана на формирование структуры и механических свойств промышленных алюминиевых сплавов В95 и АМг5, а также анализ эволюции структуры алюмоматричных композитов в процессе термодеформационного воздействия.

Композиты систем В95-TiC и АМг5-TiC с объёмным содержанием TiC: 1, 2,5, 5 и 7,5% были изготовлены методом жидкофазного *ex-situ* синтеза путем механического замешивания частиц в расплав. Частицы TiC со средним размером 1,2 мкм предварительно перемешивались в шаровой мельнице с порошком алюминия в соотношении 1:1, просушивались и вводились в расплав при механическом перемешивании. Плавление осуществлялось индукционным нагревателем в керамическом тигле в среде аргона для предотвращения окисления. После интенсивного перемешивания разливка проводилась в подогретую изложницу. Полученные отливки подвергались гомогенизационному отжигу. Для достижения требуемого уровня свойств композиты подвергались горячей многопроходной прокатке с суммарным обжатием 50% и последующей термообработкой по режиму Т1 (закалка с искусственным старением) для композитов системы В95-TiC и отжигу для композитов АМг5-TiC Механические свойства определены по испытаниям на растяжение. Исследование зеренно-субзеренной структуры (ЗСС) проводилось методом дифракции отраженных электронов (ДОЭ).

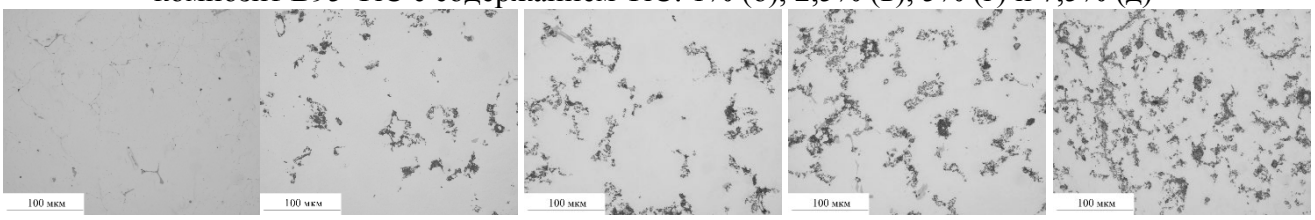
Анализ представленной на рисунках 1 и 2 микроструктуры композитов в литом гомогенизированном состоянии, показал, что TiC и его скопления в литом гомогенизированном состоянии локализуется преимущественно на границах зерен, ограничивая рост кристаллов α-Al и снижая структурную неоднородность отливки. Кроме того, наличие TiC как в В95, так и в АМг5 приводит к измельчению и глобуляризации избыточных фаз (Al_2MgCu, Mg_2Si, $Al_6(Fe, Mn)$ и Al_3Mg_2).

Добавление 1% TiC в сплавы В95 и АМг5 формирует сбалансированный комплекс свойств в литом гомогенизированном состоянии: повышение условного предела текучести и предела прочности на 35 и 26% соответственно для В95/1% TiC и повышение предела



а б в г д

Рис. 1. Микроструктура материалов в литом гомогенизированном состоянии: В95 (а); композит В95-TiC с содержанием TiC: 1% (б), 2,5% (в), 5% (г) и 7,5% (д)



а б в г д

Рис. 2. Микроструктура материалов в литом гомогенизированном состоянии: АМг5 (а); композит АМг5-TiC с содержанием TiC: 1% (б), 2,5% (в), 5% (г) и 7,5% (д)

прочности на 11% для АМг5/1% TiC с сохранением уровня пластичности на уровне исходных сплавов. При этом, для В95/2,5% TiC фиксируется небольшое увеличение пластичности относительно сплава В95. Увеличение содержание частиц свыше 1% приводит к постепенному снижению комплекса свойств в обеих системах. После многопроходной горячей прокатки и термообработки сбалансированный комплекс свойств вновь фиксируется при содержании 1% TiC. Для В95/1% TiC прирост условного предела текучести и предела прочности составил 7 и 10% соответственно при сохранении относительного удлинения на уровне В95. Для АМг5/1% TiC улучшение составило 7 и 8% при сохранении пластичности относительно АМг5. Дальнейшее увеличение содержание частиц в системе АМг5-TiC приводит к снижению комплекса механических свойств, однако условный предел текучести относительно сплава АМг5 остается на повышенном уровне при содержании TiC вплоть до 7,5%. Напротив, в системе В95-TiC при содержании 5% TiC фиксируется эффект максимального упрочнения: условный предел текучести и предел прочности увеличиваются на 25 и 20% (до 621±7 и 655±5 МПа) соответственно, однако, пластичность композита значительно снижается.

Для исследования влияния условий термодеформационного воздействия на изменение ЗСС был разработан комплексный подход, включающий конечно-элементное моделирование процесса сжатия образцов для расчета степени и скорости деформации и определение параметров ЗСС методом ДОЭ для сопоставления с рассчитанными условиями высокотемпературной деформации. Полученный набор экспериментальных данных подвергался геометрической аугментации, позволяющей увеличить объем обучающей выборки для корректного обучения нейронной сети. После обучения нейронные сети верифицировались при температурах, степенях и скоростях деформации, которые не участвовали при обучении. На заключительном этапе подхода происходит прогнозирование параметров ЗСС в зависимости от условий высокотемпературной пластической деформации.

Поскольку композит В95/2,5% TiC показал наибольшую пластичность в литом состоянии, то сравнительный анализ эволюции ЗСС в процессе высокотемпературной деформации был проведён для образцов, содержащих 2,5% TiC. В результате применения вышеописанного комплексного подхода, для каждого параметра ЗСС (средний диаметр зерна – D, доля малоугловых границ – P_L, плотность малоугловых границ – S_L) были построены нейронные сети с наибольшим средним относительным отклонением при обучении и верификации 2,3 и 8,6% соответственно. Данные нейронные сети позволили получить карты зависимостей параметров ЗСС от условий термодеформационного воздействия, по которым построены линейные профили при постоянных скоростях, представленные на рисунках 3 и 4.

Анализ данных зависимостей позволил выявить блокирующий эффект миграции границ зерен со стороны TiC, причем в композите В95/2,5% TiC этот эффект более выражен, чем в АМг5/2,5% TiC, где процессы динамического разупрочнения протекают интенсивнее, а блокирование со стороны TiC снижается с увеличением и температуры, и скорости деформации. Эволюция P_L носит немонотонный характер. При достижении «пороговой» степени деформации наблюдается один из трёх сценариев: рост, свидетельствующий об активной полигонизации; снижение, обусловленное трансформацией субграниц в большеугловые; стабилизация, отражающая равновесие между процессами генерации и разориентации субграниц. Параметр S_L в В95/2,5% TiC преимущественно возрастает по мере накопления деформации, за исключением температуры 300 °C, где наблюдается прохождение через максимумы. Напротив, в АМг5/2,5% TiC S_L демонстрирует высокую чувствительность к температурно-скоростным режимам, варьируясь от монотонного роста до спада.

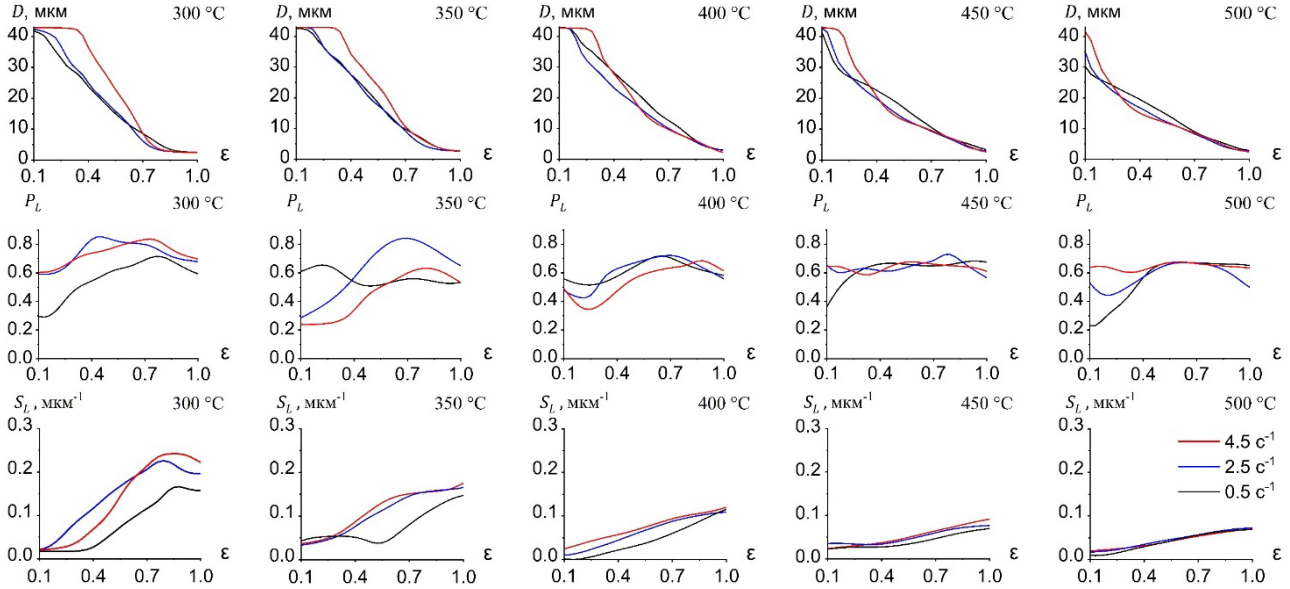


Рис. 3. Зависимость среднего диаметра зерна D, доли P_L и плотности S_L малоугловых границ от температуры и степени деформации при скоростях деформации 0,5, 2,5 и 4,5 $с^{-1}$ для композита В95/2,5% TiC

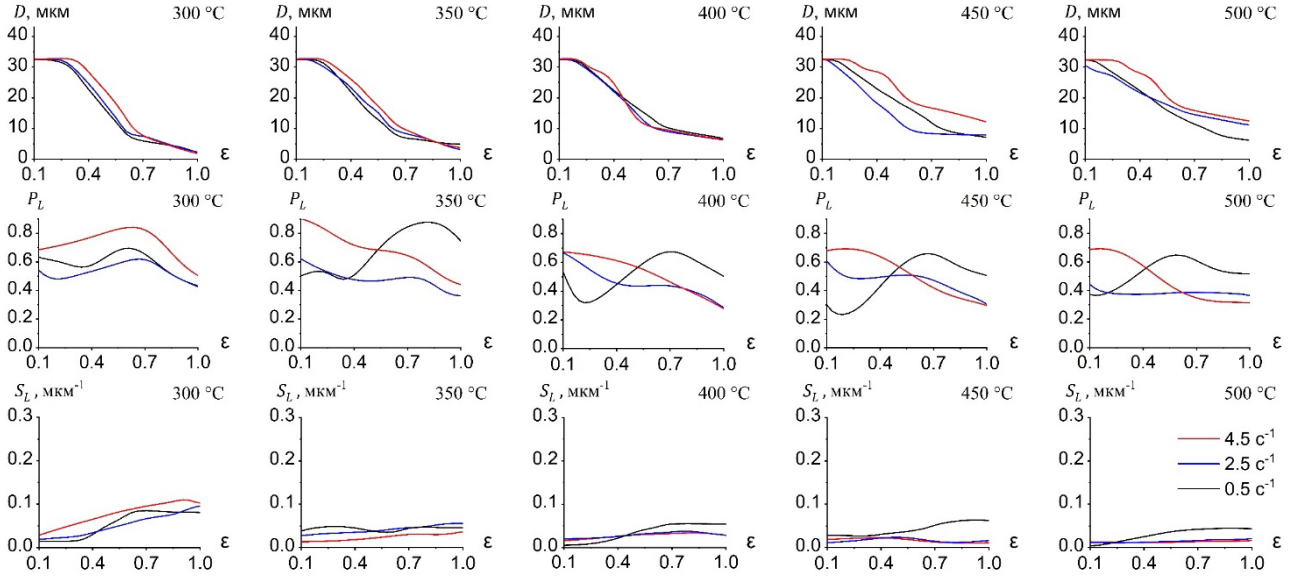


Рис. 4. Зависимость среднего диаметра зерна D, доли P_L и плотности S_L малоугловых границ от температуры и степени деформации при скоростях деформации 0,5, 2,5 и 4,5 $с^{-1}$ для композита АМг5/2,5% TiC

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ СУПЕРИОННЫХ ПРОВОДНИКОВ

Д.А. Касьянов[1], Н.Н. Биккулова[1], Г.Р. Акманова[2], А.Р.Курбангулов[1], Д.А. Долгий[1]

[1] *Стерлитамакский филиал Уфимского университета науки и технологий, Стерлитамак*
[2]*Уфимский университет науки и технологий, Уфа*
dmitriy.kasyanov99@gmail.com

В работе представлен сравнительный анализ эффективности и точности современных межатомных потенциалов машинного обучения (DeepMD, GAP, MTP, SNAP) для моделирования молекулярной динамики суперионных проводников на примере халькогенидов серебра и меди. Проведено сопоставление моделей по среднеквадратичным ошибкам сил и энергий, скорости расчета, объему обучающей выборки и точности воспроизведения диффузии катионной подрешетки.

Современные методы машинного обучения открывают новые горизонты для построения межатомных потенциалов (Machine Learning Interatomic Potentials, MLIP) в молекулярной динамике (MD), заменяя дорогостоящие квантово-механические ab initio расчеты [1, 2]. В исследовании суперионного состояния халькогенидов серебра и меди (Me2Ch: Ag2Te, Ag2Se, Ag2S, Cu2Se) применение MLIP особенно актуально, поскольку высокотемпературная α-фаза характеризуется жестким анионным каркасом и квазижидкой разупорядоченной подрешеткой катионов с высокой подвижностью [3]. Описание таких систем методами теории функционала плотности (DFT) ограничено малыми объемами ячеек и временами до 100 пс, тогда как MLIP позволяют проводить наносекундные расчеты на тысячах атомов в пакете LAMMPS.

В работе сопоставлены четыре основных подхода к построению потенциалов: Deep Potential (DeePMD, дескриптор se_e2_a), Gaussian Approximation Potential (GAP с дескрипторами SOAP), Moment Tensor Potential (MTP на основе тензоров моментов) и Spectral Neighbor Analysis Potential (SNAP на биспектральных инвариантах) [2–5]. Эти методы оценивались по точности (RMSE энергии ~1–10 мэВ/атом, сил ~20–40 мэВ/Å), вычислительной скорости (10^{-4}–10^{-3} с/атом/шаг) и эффективности данных с учетом расхождений в динамике атомов и редких событий миграции, где MLIP могут показывать ошибки в 8–25% для сил на мигрирующих ионах.

DeepMD, основанный на глубоких нейронных сетях, обеспечивает высокую точность и устойчивость для многокомпонентных систем (с погрешностью энергии ~1 мэВ/атом), превосходно масштабируется на GPU, но требует значительного объема обучающих данных (~10^3 энергий, ~10^5 сил). GAP на основе гауссовской регрессии эффективен для малых наборов данных, но существенно уступает MTP по скорости. SNAP с гиперсферическими бисспектрами быстр (до 10^{-6} с/атом/шаг на кластерах), однако уступает в точности для сложных разупорядоченных структур и занижает высоту диффузионных барьеров. MTP с тензорными моментами наиболее точен (до 1 мэВ/атом) и эффективен (требует до 90–99% меньше данных, чем нейросетевые модели для аналогичной точности), идеален для расчетов на многоядерных CPU, обеспечивая надежное воспроизведение активационных барьеров миграции серебра.

Таблица 1. Сравнительные параметры межатомных потенциалов машинного обучения

Аспект анализа	DeepMD	MTP	GAP (SOAP)	SNAP
RMSE энергии, мэВ/атом	1.0 – 3.0	0.8 – 2.5	1.5 – 3.5	4.0 – 8.0
RMSE сил, мэВ/Å	25 – 45	20 – 40	30 – 55	60 – 100
Скорость (с/атом/шаг)	$10^{-4} – 10^{-3}$ (GPU)	$10^{-5} – 10^{-4}$ (CPU)	$10^{-3} – 10^{-2}$ (CPU)	$10^{-6} – 10^{-5}$ (CPU/GPU)
Объем выборки (конфиг.)	$10^{3} – 10^{4}$	$10^{2} – 10^{3}$	$10^{2} – 10^{3}$	$10^{2} – 10^{3}$
Воспроизведение диффузии	Высокая надежность	Высокая точность барьеров	Высокая надежность	Занижение барьеров

Таким образом, для моделирования суперионного переноса катионов и расчета кинетических параметров в халькогенидах металлов на CPU-архитектурах наиболее перспективен потенциал MTP, в то время как для моделирования фазовых переходов и многокомпонентных твердых растворов на GPU-кластерах целесообразно применение DeePMD.

Литература

1. J. Behler, M. Parrinello Generalized Neural-Network Representation of High-Dimensional Potential-Energy Surfaces. Phys. Rev. Lett., 2007, 98(14), 146401.
2. A.P. Bartók, M.C. Payne, R. Kondor, G. Csányi Gaussian Approximation Potentials: The Accuracy of Quantum Mechanics, without the Electrons. Phys. Rev. Lett., 2010, 104 (13), 136403.
3. A.V.Shapeev Moment Tensor Potentials: A Class of Systematically Improvable Interatomic Potentials. Multiscale Model. Simul., 2016, 14(3), 1153–1173.
4. A.P. Thompson, L.P. Swiler, C.R. Trott et al. Spectral neighbor analysis method for automated generation of quantum-accurate interatomic potentials. J. Comput. Phys., 2015, 285, 316–330.
5. H. Wang, L. Zhang, J. Han, E. Weinan DeePMD-kit: A deep learning package for many-body potential energy representation and molecular dynamics. Comput. Phys. Commun., 2018, 228, 178–184.

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ДУГОВОЙ ПЛАЗМЫ И ГРАНУЛОМЕТРИИ ИСХОДНЫХ КОМПОНЕНТОВ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА СИНТЕЗИРОВАННЫХ МУЛЛИТОВЫХ МАТЕРИАЛОВ

Ким А.В. Абышова А.Б., Литовко А.В.

Томский государственный архитектурно-строительный университет, Томск
alina.kkim04@mail.ru

Муллитовая керамика обладает уникальным сочетанием термостойкости, коррозионной стойкости и низкой теплопроводности, однако традиционные твердофазные методы её получения требуют длительных высокотемпературных обжигов [1-3]. Применение высокоэнергетических источников, таких как дуговая плазма, позволяет реализовать условия термодинамической неравновесности, ускорить кинетику фазообразования и формировать материалы с метастабильной структурой и улучшенными свойствами [1-3].

Цель работы является установить закономерности влияния режимов плазменно-дугового воздействия и дисперсности исходных порошков SiO_2 и Al_2O_3 на фазовый состав, микроструктуру и механические характеристики синтезированных муллитсодержащих материалов.

Синтез проводился на установке с дуговой плазмой постоянного тока при варьировании силы тока (60–100 А) и времени воздействия (5–30 с) [4-6]. Параметр N используется для определения молекулярного соотношения Al_2O_3/SiO_2. Таким образом, составы с N = 1,5, 2,33, 2,97, 4,0 и 9,0 соответствуют 60,0, 70,0, 74,8, 80,0 и 90,0 мас.% Al_2O_3 соответственно. Расчеты проводились с использованием молярной массы Al_2O_3 (101,96 г/моль) и SiO_2 (60,08 г/моль). Исследуемые составы представлены в таблице 2.

Таблица 2. Состав

	№ 1					№ 2			
N	1.5	2.33	2.97	4.0	9.0	0.25	0.43	0.67	1.0
Al_2O_3	60.0	70.0	74.8	80.0	90.0	20	30	40	50
SiO_2	40.0	30.0	25.2	20.0	10.0	80	70	60	50

Высокоглиноземистый состав №1 (60–90 мас.% Al_2O_3) соответствует классическому диапазону образования муллита и его сосуществования с корундом (α-Al_2O_3) и расплавом. Высококремнеземистый состав №2 (20–50 мас.% Al_2O_3) расположен вблизи эвтектики SiO_2–муллит. Эти составы выбраны для изучения влияния высоковязкого кремнеземного расплава на кинетику диффузии глинозема и зарождение кристаллической фазы муллита.

По результатам работы определён оптимальный режим синтеза: при токе 80–90 А и времени 20–30 с шихта стехиометрического состава (N=Al_2O_3/SiO_2=2,97) полностью переходит в расплав, формируя сферическую каплю с общей пористостью ~10 % и температурой 2550–2900 К. В условиях экстремального нагрева реализуется изоморфное замещение $Al^{3+} \leftrightarrow Si^{4+}$, приводящее к катионному беспорядку и образованию метастабильного муллита переменного состава $Al_{4+2x}Si_{2-2x}O_{10-x}$. Продукты плавления характеризуются двухфазной структурой: кристаллическим каркасом (муллит при N=1,5–4,0 или корунд при N≥9,0) и межзеренной аморфной SiO_2-обогащённой фазой.

Выявлено, что уменьшение размера частиц SiO_2 с 315 до 80 мкм (при фиксированном Al_2O_3 – 80 мкм) повышает структурную гомогенность, снижая пространственную неоднородность распределения связей Si–O–Al на 50 % и уменьшая ширину ИК-полосы до ~52 $см^{-1}$. Керамика, спечённая из продуктов плазменного синтеза при 1550 °C, достигает кажущейся плотности 2,85 $г/см^3$, открытой пористости ~2 % и микротвёрдости ~1100 HV (10,8 ГПа). На рисунке 1 показана зависимость структуры и механических свойств

муллитовой керамики, синтезированной из расплавленных продуктов при соотношении Al_2O_3/SiO_2 = 2,97, от температуры спекания.

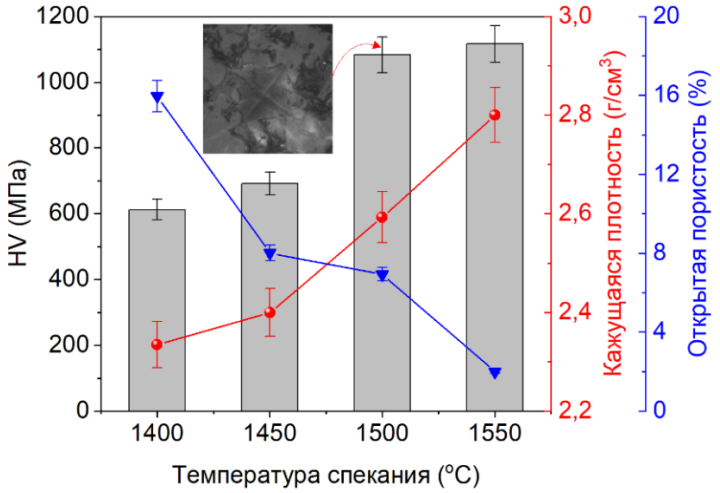


Рис. 1. Зависимость температуры спекания от твердости, плотности и пористости муллитовой керамики, полученной методом дугового плазменного синтеза при соотношении Al_2O_3/SiO_2 = 2,97

Таким образом, плазменно-дуговой метод обеспечивает энергоэффективное и быстрое получение муллитовой керамики с заданными структурно-механическими характеристиками. Установленные взаимосвязи между параметрами плазмы, гранулометрией шихты и конечными свойствами материала создают научную основу для разработки ускоренных технологий синтеза высокотемпературных оксидных керамик.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-29-20237 (https://rscf.ru/project/25-29-20237/) и гранта в форме субсидии, выделяемого Департаментом по научно-технологическому развитию и инновационной деятельности Томской области (Соглашение №02/4/2025).

Литература

1. B.O. Owino, F.O. Aramide. A Review on the Effects of Additives on the Morphology and Physico-Mechanical Properties of Mullite Refractory Ceramics. Trans Indian Natl. Acad. Eng., 2025, 11, 25-43.
2. W. Zhang, Wy. Dai. State of the art of lightweight aggregates used in lightweight refractories for working lining of high-temperature furnaces. J. Iron Steel Res. Int., 2024, 31, 1320-1343.
3. H. Schneider, R.X. Fischer, J. Schreuer, D.J. Green. Mullite: Crystal Structure and Related Properties. J. Am. Ceram. Soc., 2015, 98, 2948-2967.
4. В.В. Шеховцов, М.А. Семеновых, А.Б. Улмасов [и др.]. Оптимизация синтеза муллита в плазменно-дуговом разряде и сравнительный анализ спекания керамики на основе природного сырья и чистых оксидов. Вестник Томского государственного архитектурно-строительного университета., 2025, 27(6), 172-186.
5. V. Shekhovtsov. Influence of arc plasma parameters and particle size distribution of initial components on structure and properties of synthesized mullite materials, Ceramics International, 2026, 52(12), 20570-20585.
6. В.В. Шеховцов, Н.К. Скрипникова, О.Г. Волокитин, Р.Е. Гафаров. Синтез муллитсодержащей керамики в среде низкотемпературной плазмы. Физика и химия стекла, 2022, 48(5) 630-634.

СТРУКТУРА И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СТАЛИ 07Х20Г11АН6 ПОСЛЕ ХОЛОДНОЙ ПРОКАТКИ НА 60 % И СТАРЕНИЯ ПРИ 700 ℃

А.В. Ким[1, 2], Н.А. Полехина[1], С.А. Аккузин[1], И.Ю. Литовченко[1, 2]

[1]Институт физики прочности и материаловедения имени В.Е. Панина СО РАН, Томск
[2]Томский государственный университет, Томск
kim.a.v@ispms.ru

Высокоазотистые аустенитные стали находят применение как конструкционные материалы в разных отраслях промышленности: машиностроении, строительстве, химической промышленности. Азот в составе аустенитных сталей повышает их прочность как после закалки, так и после термомеханической обработки, и благоприятно воздействует на коррозионную стойкость, пластичность и свариваемость. При этом, необходимо учитывать, что азот влияет на структурно-фазовые превращения сталей при повышенных температурах. При этом возможно образование нитридов, замещающих карбиды. Таким образом, существует необходимость в исследованиях высокоазотистых сталей после термических и термомеханических обработок, а также высокотемпературного старения.

В настоящей работе исследована стабильная высокоазотистая аустенитная сталь ВНС-53-Ш-М (07Х20Г11АН6) в холоднодеформированном состоянии и после длительного старения. Исходное состояние получено закалкой от Т = 1100 °С с выдержкой 1 час и последующей деформацией прокаткой на ≈ 60% при комнатной температуре. После холодной деформации образцы подвергали старению при Т = 700 °С в течение 100 часов. Особенности микроструктуры стали исследовали методами растровой электронной микроскопии с использованием дифракции обратно-рассеянных электронов (РЭМ ДОРЭ). Механические испытания были проведены при Т = 20 °С на машине для растяжения МИМ 2-50.

Показано, что холодная деформация приводит к формированию вытянутых в направлении прокатки зерен с высокой плотностью микродвойников, толщиной менее 100 нм. Обнаружено распространение полос локализации деформации в микродвойниковой структуре и образование фрагментов субмикро- и нанокристаллического масштаба с мало- и высокоугловыми границами разориентации.

Исследования методами РЭМ ДОРЭ показывают, что примерно 90 % зерен имеют размеры менее 5 мкм. В результате старения в структуре стали наблюдается рекристаллизация. Обнаружены отдельные крупные зерна, содержащие двойники отжига, размером до 15 микрон и окруженные скоплениями мелких зерен. Деформационные двойники в структуре стали не обнаружены. Из анализа карт средних разориентаций (KAM-карты) следует, что внутри зерен после старения средние разориентации не превышают 2°. Локально обнаружено выделение грубодисперсных (около 500 нм) частиц карбидов типа $M_{23}C_6$ и нитридов типа Cr_2N, внутри которых наблюдаются малоугловые границы разориентации. Вблизи частиц вторых фаз повышены локальные средние разориентировки.

Предел текучести в результате старения снижается на ~ 500 МПа относительно холоднодеформированного состояния, достигая 667 МПа. Предел прочности на ~ 400 МПа, при этом достигая 1030 МПа. Относительное удлинение за счет формирования мелкозернистой структуры увеличивается на ~ 12%, до 19,2 %.

Несмотря на формирование рекристаллизованной структуры в изученных условиях старения, сталь демонстрирует хорошее сочетание прочностных и пластических свойств.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема номер FWRW-2026-0005.

АНАЛИЗ РЕЖИМОВ КОМПАКТИРОВАНИЯ МЕТАЛЛОМАТРИЧНОГО КОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ СПЛАВА $DyAl_2$

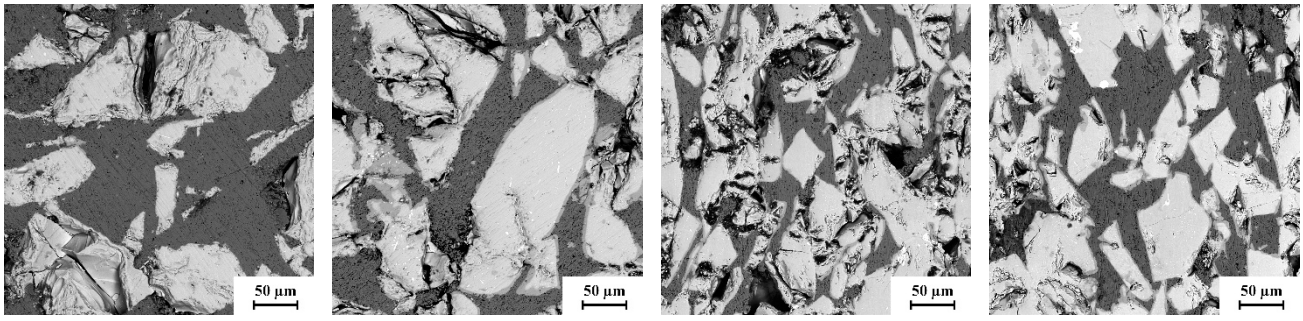
К.К. Кирилюк, И.И. Мусабиров, М.И. Нагимов

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
kirkonst2002@mail.ru

Известно, что интерметаллидные соединения на основе редкоземельных элементов со структурой типа фазы Лавеса демонстрируют высокие магнитокалорические свойства в области магнитного фазового превращения, которое протекает в области криогенных температур. Практическое применение материалов ограничивается высокой хрупкостью сплавов в литом состоянии.

В данной работе поставлена задача создания прочного металломатричного композитного материала с высокими величинами функциональных свойств. В качестве функционального материала выбрано соединение $DyAl_2$, точка Кюри которого находится на отметке 62 К. После выплавки сплава дуговым способом он был подвергнут ручному измельчению в ступе. После разделения на фракции для эксперимента выбран порошок с размером частиц около 100 мкм. В качестве металлической матрицы выбрана мелкозернистая медь. Смесь порошков подготовлена в пропорции 70/30 по весу. Режимы компактирования заключали в себе прессование при нагрузках 150, 300, 450 или 600 МПа при температуре 600°С с выдержкой в течении 5 минут. Таким образом было получено 4 компакта, которые были подвергнуты микроструктурному анализу с помощью растровой электронной микроскопии в режиме композиционного контраста.

Качественный анализ целостности компакта при пробоподготовке тонких исследовательских образцов (1-2 мм) показал, что с ростом нагрузки прессования компакт становится более прочным. Исследование микроструктуры выполнено на шлифах, подготовленных механической полировкой с финишной полировкой на алмазной пасте. Во всех четырех компактах частицы равномерно распределены в медной матрице, однако между сплавом и медью наблюдаются поры, доля которых уменьшается с увеличением нагрузки при прессовании (Рис. 1.).



а б в г

Рис.1. Микроструктура композитов, прессованных под нагрузкой 150 МПа (а), 300 МПа (б), 450 МПа (в) и 600 МПа (г) при 600°С с выдержкой в течение 5 мин.

В структуре при больших увеличениях наблюдается новая фаза, которая представляет собой соединение Dy-Al-Cu. При высоком давлении медь диффундирует в интерметаллидное соединение. Формирование этой вторичной фазы снижает долю сплава $DyAl_2$ в композите и может снизить функциональные свойства.

Проведён отжиг компактов в вакууме (спекание) при температурах 700°С и 800°С в течение 30 минут для каждого компакта. Исследование микроструктуры показало, что отжиг приводит к увеличению объёмной доли новой вторичной фазы.

Подготовлен эксперимент по исследованию магнитных свойств подготовленных четырех компактов. Необходимо оценить падение намагниченности образца в виде компакта по сравнению с образцом в литом состоянии.

Наличие высокой пористости компактов предполагает изменение либо режимов прессования, либо изменения доли порошков в смеси. В целом первые эксперименты показывают перспективы данного направления исследований с возможностью использования другой пластичной матрицы или другого функционального соединения.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИПСМ РАН.

ВЛИЯНИЕ ЛОКАЛЬНОГО НАПРЯЖЕННОГО СОСТОЯНИЯ НА МЕХАНИЗМ РАЗРУШЕНИЯ КЗ И УМЗ МАТЕРИАЛОВ С ОЦК, ГЦК И ГПУ РЕШЕТКОЙ ПРИ ОДНОКРАТНЫХ ВИДАХ НАГРУЖЕНИЯ

Г.В. Клевцов[1], Р.З. Валиев[2], Н.А. Клевцова[1]

[1]*Тольяттинский государственный университет, Тольятти*
[2]*Уфимский университет науки и технологий, Уфа*
klevtsov11948@mail.ru

Локальное напряженное состояние материала является фундаментальным понятием в механике разрушения, определяющем механизм разрушения, размер, количество и форму пластических зон, образующихся у вершины распространяющейся трещины, и является одним из основных факторов, влияющих на сопротивление материала развитию трещины. В механике разрушения различают два предельных локальных состояния материала у вершины трещины: плоскую деформацию (ПД) и плоское напряженное состояние (ПН) [1]. Однако на практике разрушение металлических материалов нередко происходит в переходной области (ПД↔ПН). Одним из основных критериев реализации условий ПД при испытании образцов на статическую трещиностойкость K_{1C}, по ГОСТ 25.506-85, является условие $t/(K_{1C}/\sigma_{0.2})^2 \geq 2.5$. Однако, согласно положению механики разрушения, наиболее объективную информацию о локальном напряженном состоянии материала в момент разрушения дает анализ размеров и формы пластических зон, образующихся у вершины трещины [1]. Основываясь на данном положении, в работах [2, 3] предложен единый критерий оценки локального напряженного состояния материала у вершины трещины при однократных видах нагружения (статическом, ударном) как отношение максимальной глубины пластической зоны под поверхностью изломов h_{max} к толщине образца или детали t, т.е. h_{max}/t. При ПД отношение $h_{max}/t \leq 10^{-2}$, при ПН – $h_{max}/t \geq 10^{-1}$, а в переходной области (ПД↔ПН) $10^{-2} < h_{max}/t < 10^{-1}$ [2, 3].

Однако, определять глубину пластических зон под поверхностью изломов – это сложный и трудоемкий процесс. Поэтому в работе [3] была установлена связь критериев оценки локального напряженного состояния материалов h_{max}/t и $t/(K_{1C}/\sigma_{0.2})^2$ (рис. 1).

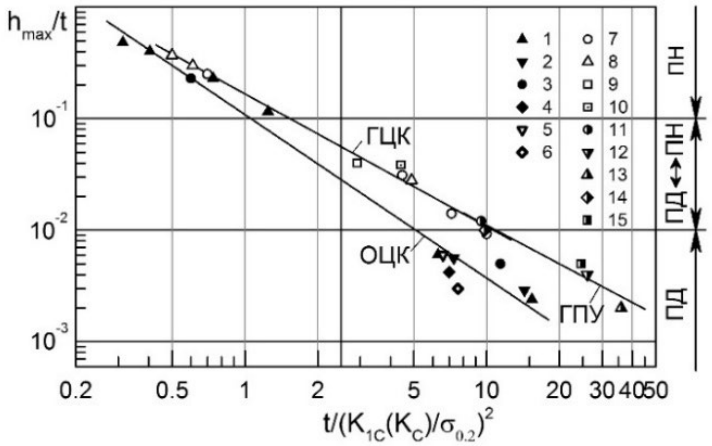


Рис. 1. Связь критериев $t/(K_{1C}/\sigma_{0.2})^2$ и h_{max}/t для материалов в ОЦК решеткой (темные точки), ГЦК решеткой (светлые точки) и ГПУ решетка (комбинированные точки) в КЗ состоянии (1-4, 7-9, 11, 14) и в УМЗ состоянии (5, 6, 10, 12, 13, 15). Вертикальные линии соответствуют условиям $t/(K_{1C}/\sigma_{0,2})^2 \geq 2{,}5$. 1 – сталь 20; 2 – сталь 40; 3 – 15Х2МФА; 4 – сталь 15; 5, 7 – 09Г2С; 6 – сталь 45; 8 – Д16; 9 – 03Х13АГ19; 10, 11 – АК4-1; 12-14 – ВТ6; 15, 16 – ВТ8М-1

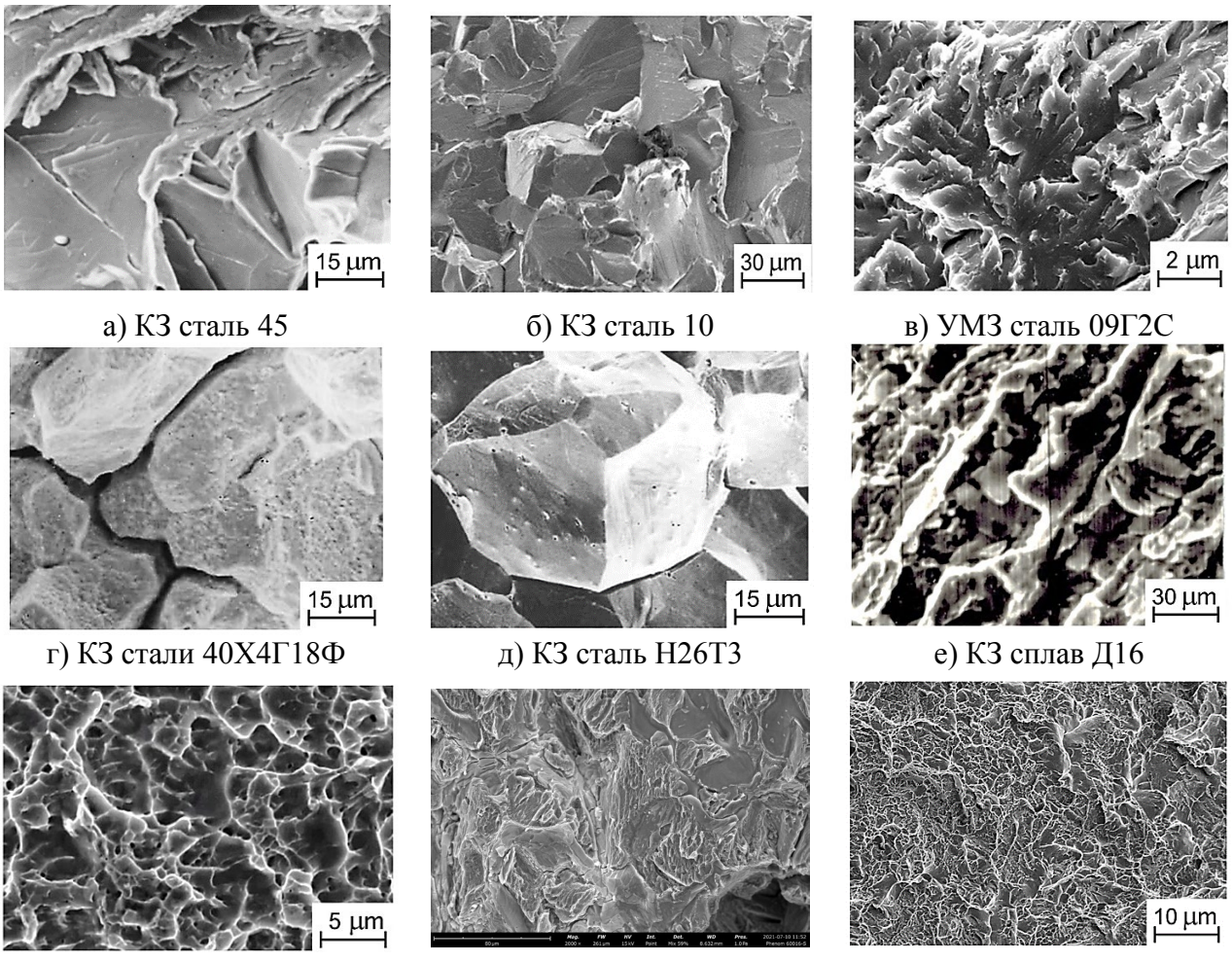
В практике диагностики аварийного разрушения важно уже при первичной экспертизе иметь представление о локальном напряженном состоянии материала в разрушенном

изделии. В этом плане важно установить связь локального напряженного состояния материала с механизмом разрушения (микрорельефом поверхности изломов).

Целью настоящей работы является установление закономерностей влияния локального напряженного состояния на механизм разрушения при однократных видах нагружения (ударном и статическом) материалов с ОЦК, ГЦК и ГПУ решетками как в крупнозернистом (КЗ), так и в ультрамелкозернистом (УМЗ) состоянии.

В качестве исследуемых материалов были использованы материалы с ОЦК решеткой: сталь 45, сталь 10 и сталь 09Г2С; материалы с ГЦК решеткой: аустенитные стали Н26Т3, Н32Т3, AISI 321, 40Г18Ф, 40Х4Г18Ф, 03Х13АГ19, алюминиевые сплавы Д16 и АК4-1; материалы с ГПУ решеткой: титан Grade4, титановые сплавы ВТ6, ВТ8М-1 и магниевый сплав Mg6Al. Образцы испытывали на статическую трещиностойкость и ударную вязкость в широком интервале температур. Локальное напряженное состояние материала у вершины трещины оценивали по критериям h_{max}/t и $t/ (K_{1C} /\sigma_{0.2})^2$. Глубину пластических зон под поверхностью изломов определяли рентгеновским методом. Микрорельеф поверхности изломов исследовали в растровых электронных микроскопах Sigma фирмы «ZEISS» и JSM-U3.

Микрорельеф изломов исследуемых материалов представлен на рисунках 2-4.

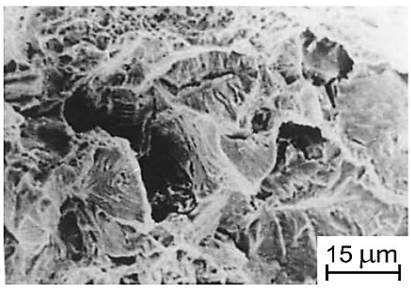


а) КЗ сталь 45 б) КЗ сталь 10 в) УМЗ сталь 09Г2С

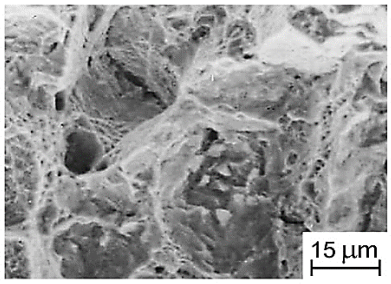
г) КЗ стали 40Х4Г18Ф д) КЗ сталь Н26Т3 е) КЗ сплав Д16

ж) УМЗ сплав ВТ6 з) УМЗ сплав Mg6Al и) УМЗ титан

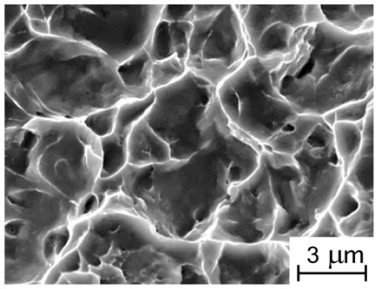
Рис. 2. Микрорельеф изломов материалов с ОЦК (а-в), ГЦК (г-е) и ГПУ (ж-и) решеткой, полученных при -196 ^{0}С в условия ПД: КЗ сталь 45 удар (а); КЗ сталь 10 удар (б); УМЗ сталь 09Г2С статика (в); КЗ стали 40Х4Г18Ф (г), удар; КЗ сталь Н26Т3, старение, удар (д); КЗ сплав Д16 (Т6), статика (е); УМЗ сплав ВТ6 статика (ж); УМЗ магниевый сплав Mg6Al, удар (з); УМЗ титан, удар (и)



а) КЗ сталь 40Х4Г18Ф

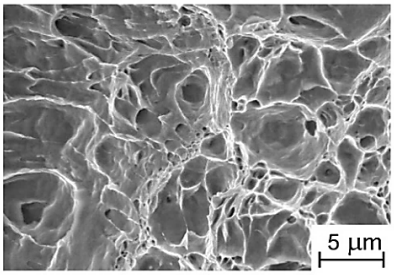


б) КЗ сталь 40Х4Г18Ф

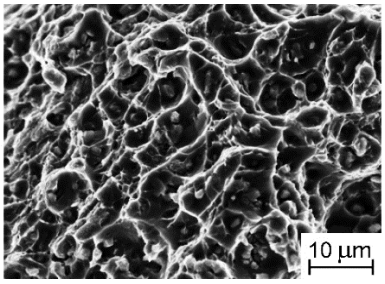


в) КЗ сплав ВТ6

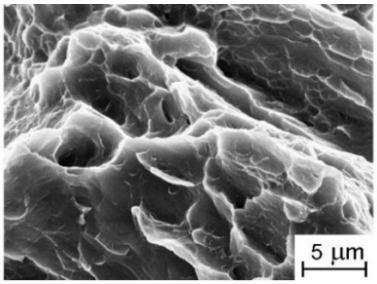
Рис. 3. Микрорельеф изломов материалов с ГЦК (а, б) и ГПУ (в) решеткой, полученных в переходной области (ПД↔ПН): КЗ сталь 40Х4Г18Ф, закалка, удар, -196 ^{0}С (а); КЗ сталь 40Х4Г18Ф, старение, удар, 20 ^{0}С (б); КЗ сплав ВТ6, статика, -196 ^{0}С (в)



а) УМЗ сталь 10



б) УМЗ сплав АК4-1



в) УМЗ сплав Mg6Al

Рис. 4. Микрорельеф изломов материалов с ОЦК (а), ГЦК (б), ГПУ (в) решеткой, полученных в условия плоского напряженного состояния (ПН): УМЗ сталь 10, удар, 50 ^{0}С (а); УМЗ сплав АК4-1, удар, 20 ^{0}С (б); УМЗ сплав Mg6Al, статика, -196 ^{0}С (е)

Заключение. Для однократных видов нагружения (статическом, ударном) не всегда представляется возможным установить однозначную связь между механизмами разрушения материалов с ОЦК, ГЦК и ГПУ решеткой и локальным напряженным состоянием материала у вершины трещины. Однако установлены некоторые частные закономерности:

1. Разрушение материалов, независимо от типа кристаллической решетки, по механизму скола, квазискола или межзеренного хрупкого разрушения свидетельствует о реализации условия плоской деформации (ПД).
2. Разрушение материалов с ГЦК решеткой по смешанному механизму свидетельствует о реализации переходного состояния (ПД↔ПН).
3. Вязкое разрушение материалов с образованием ямочного микрорельефа, независимо от типа кристаллической решетки, свидетельствует о реализации условий плоского напряженного (ПН) состояния.

Встречающееся противоречие между реализацией механизма разрушения материалов с ГЦК решеткой в переходной области и оценкой локального напряженного состояния материала по критерию $t/(K_{1C}/\sigma_{0,2})^2 \geq 2.5$ и по ГОСТ 25.506-85 для ПД может быть устранено путем использования критериев реализации условия ПД: $t/(K_{1C}/\sigma_{0,2})^2 \geq 5$ для материалов с ОЦК решеткой и $t/(K_{1C}/\sigma_{0,2})^2 \geq 10$ для материалов с ГЦК и ГПУ решеткой (рис. 1).

Литература

1. Броек Д. Основы механики разрушения. Пер. с англ. М.: Высшая школа, 1980. 368 с.
2. Г.В. Клевцов, Л.Р. Ботвина, Н.А. Клевцова, Л.В. Лимарь, Фрактодиагностика разрушения металлических материалов и конструкций. - М.: МИСиС, 2007. 264 с.
3. G.V. Klevtsov, R.Z. Valiev, N.A. Klevtsova, A.M. Glezer, I.N. Pigaleva. Local State of Stress of the Material at the Crack Tip for Various Types of Loading. Russian Metallurgy (Metally), 2021, 10, 1177–1182. DOI: 10.1134/S0036029521100165

ЗАВИСИМОСТЬ УСТОЙЧИВОСТИ КУБИЧЕСКОЙ ТЕКСТУРЫ ОТ ТЕМПЕРАТУРНОГО РЕЖИМА ГОРЯЧЕЙ ПРОКАТКИ

Д.Н. Клепов[1], Е.В. Арышенский[1], С.О. Ким[1], М.В. Арышенский[2], Я.А. Ерисов[3]

[1]*Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк*
[2]*АО «СМЗ», Самара*
[3]*Самарский университет, Самара*
klepovdenis17@xmail.com

В современной промышленности алюминиевые сплавы системы Al-Mg-Si активно набирают обороты по использованию благодаря сочетанию таких характеристик как легкость, высокая прочность, коррозионная стойкость и формуемость, что является необходимостью в автомобильной отрасли [1, 2]. Современные задачи листовой холодной штамповки алюминиевых сплавов, в том числе серии 6ххх, требуют дальнейшего снижения анизотропии листа, приводящей к большому количеству брака. Неравномерность течения материала вызвана в первую очередь кристаллографической текстурой, формируемой в процессе производства листовых заготовок на всех этапах, таких как горячая и холодная прокатка и последующую термическую обработку. Особенное внимание в исследовании уделяется текстуре Куба, поскольку именно на основе данной текстуры происходит развитие теорий о формирование текстур рекристаллизации. Помимо этого, данная текстурная компонента имеет широкую технологическую значимость [3].

Несмотря на широкие научные исследования о образовании текстуры в алюминиевых сплавах, для термически упрочняемых сплавов 6ххх серии недостаточно исследований проблемы влияния различных температурных режимов на стабильность текстуры Куба. В данном исследовании получены сведения о формировании и стабильность кубической текстуры на примере сплава 6022 в процессе холодной прокатки и последующей обработки Т4 и установлена корреляция между текстурными превращениями и показателями штампуемости.

Заготовка для исследований получена путем гомогенизационного отжига при 545 градусов в течении 4 часов, далее на реверсивном стане получен расчет толщиной 50мм. Горячая прокатка проводилась на непрерывном стане до конечной толщины 5мм. Контроль температуры раската после выхода из непрерывной группы осуществлялся с помощью контактной термопары.

Исследованы 2 технологических маршрута с температурой раската после горячей прокатки 270 и 350 градусов соответственно. Для каждого из маршрутов исследованы текстура и микроструктура отдельно исследовалась для горячекатанного, холоднокатанного состояний и после отжига и Т4. Пригодность к штамповке изучалась по расчетным вкладам ориентировок в коэффициенты нормальной и плоскостной анизотропии. Параметры анизотропии для двух маршрутов после обработки Т4 представлены в таблице 1.

Таблица 1. Результаты РСА исследования образцов в состояниях 1 и 2

Маркировка	Номер группы	ΣR	ΔΣR
1-Т4	1 (R0)	0,566	0,099
	2(R45)	0,432	
	3(R90)	0,496	
2-Т4	1 (R0)	0,913	0,18
	2(R45)	0,669	
	3(R90)	0,785	

Микроструктура исследована с помощью оптического металлографического микроскопа OLYMPUS GX-51. Средний размер зерна, где это возможно, высчитывался методом секущих отрезков по ГОСТ 21073.2. Текстура исследовалась с использование рентгеновского дифрактометра ДРОН-7 методом X-Ray.

В результате исследований установлено, что горячая прокатка при 270 градусах формирует деформированную полосчатую структуру с протяженными кубическими участками и высокой долей текстурной компоненты S, что с последующим отжигом обеспечивает сильное развитие кубической текстуры вплоть до объемной доли и более мелких зерен вокруг. Установлено, что после обработки Т4 оба маршрута имеют близкую объемную долю кубической ориентировки, однако маршрут 270 градусов обеспечивает меньшую плоскостную анизотропию. Показано, что пониженная температура горячей прокатки повышает стабильность кубической текстуры при холодной деформации и улучшает штампуемость листового проката.

Данные результаты поспособствуют более глубокому анализу проблемы анизотропии механических свойств и связанную с ней эволюцию кристаллографической текстуры в алюминиевых сплавах шестой серии. Контроль анизотропии путем изменения параметров изготовления заготовок позволит снизить анизотропию и количество выпускаемого брака, а также материальные и временные затраты на производствах.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-19-00590, https://rscf.ru/project/219-00590/).

Литература

1. Fridlyander, I. & Sister, V. & Grushko, O. & Berstenev, V. & Sheveleva, L. & Ivanova, L. Aluminum Alloys: Promising Materials in the Automotive Industry. Met. Sci. Heat Treat., 2002, 44 365-370.
2. Hirsch, Juergen. Recent development in aluminium for automotive applications. Trans. Nonferrous Met. Soc. China., 2014, 24 1995-2002.
3. Hutchinson, Bevis. The Cube Texture Revisited. MSF, 2011, 702-703 3-10.

ВЛИЯНИЕ ГОМОГЕНИЗАЦИОННОГО ОТЖИГА НА ТЕРМОСТАБИЛЬНОСТЬ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СПЛАВОВ АЛТЭК СИСТЕМЫ AL-CU-MN

А.А. Клепова, Е.В. Арышенский[1], К.А. Малкин[2], С.В. Коновалов[1]
[1]*Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк*
[2]*Самарский национальный исследовательский университет им. С.П. Королева, Самара*
levagina_aa@sibsiu.ru

Сохранение повышенного спроса на алюминиевые сплавы в значительной степени обусловлено тем, что легирование позволяет целенаправленно изменять их физико-механические и эксплуатационные характеристики.

Например, сплавы АЛТЭК (2-3% Cu, 1-2%Mn), обладающие высоким потенциалом для применения в электротехнической промышленности [1]. Химический состав сплавов обеспечивает формирование термостабильной фазы $Al_{20}Cu_2Mn_3$ в сочетании с твердым раствором алюминия, при минимальном содержании других фаз. Наноразмерные частицы данной фазы эффективно тормозят процессы рекристаллизации при температурах до 400°С. Указанная структура не требует проведения гомогенизационного отжига перед деформацией. Однако при введении упрочняющих добавок (магний, переходные металлы) гомогенизация может стать необходимой технологической операцией для устранения химических неоднородностей.

Цель данной работы – исследование влияния гомогенизационного отжига на термическую стабильность механических свойств сплавов АЛТЭК.

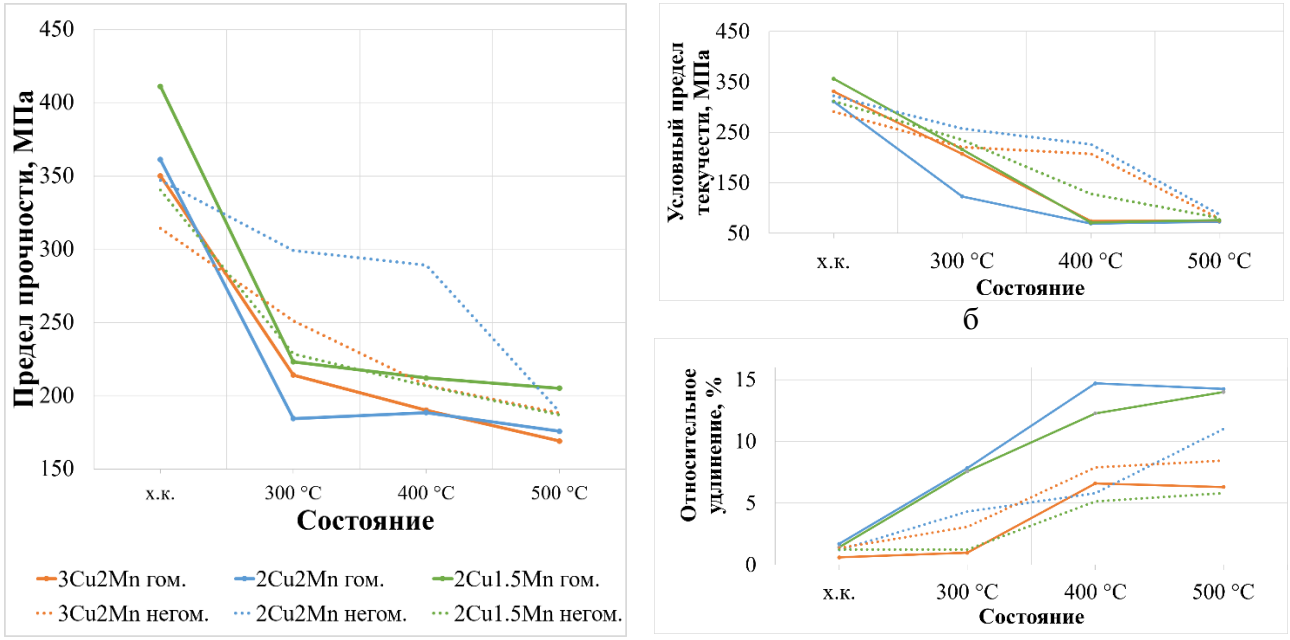
Для исследования были выбраны базовые сплавы без дополнительных химических добавок: 3Cu2Mn, 2Cu2Mn, 2Cu1.5Mn. Каждый сплав был отлит в стальной кокиль.

Отлитые слитки разрезали пополам. Половину каждого слитка гомогенизировали при 450°С (30 ч). Далее – горячая прокатка при 380-420°С до 2 мм, промежуточный отжиг 420°С (1 ч), холодная прокатка до 0,2 мм (ε=90%) и финальный отжиг при 300-500°С (3 ч).

Механические свойства и удельную электропроводность (УЭП) определяли на образцах толщиной 0,2 мм на этапах деформационной и термической обработки. Испытания на растяжение проводили на машине Zwick по ГОСТ 1497-2023, УЭП измеряли мультиметром МУ68 с источником питания MAISHENG MS3010D-MS002 (30 В, 10 А). Микроструктуру исследовали методом ПЭМ.

Проведение гомогенизационного отжига способствует дальнейшему активному протеканию распада пересыщенного твердого раствора, что подтверждается данными измерениями УЭП на этапах термодеформационной обработки. Гомогенизированные сплавы характеризуются более высокой удельной электропроводностью и более ранним завершением распада твердого раствора (300 °С), тогда как в негомогенизированных сплавах распад завершается при 400 °С. Так, например, в холоднокатанном состоянии УЭП негомогенизированного сплава 3Cu2Mn составила 21,4 МСм/м, в то время как для гомогенизированного – 24,1 МСм/м.

Образцы без гомогенизации демонстрируют более высокие механические свойства, чем гомогенизированные образцы (рис.1). Например, после отжига при 400 °С предел прочности негомогенизированного сплава 3Cu2Mn составляет 207 МПа, тогда как гомогенизированного – 190 МПа. Немаловажно и то, что гомогенизированные сплавы разупрочняются интенсивнее.



а б в

Рис. 1. Механические свойства исследуемых сплавов: предел прочности (а), условный предел текучести (б), относительное удлинение (в)

Различия в поведении свойств объясняются микроструктурными особенностями. По результатам проведенного ПЭМ-исследования установлено, что основными структурными составляющими являются фаза $Al_{20}Cu_2Mn_3$, встречающаяся в виде пластинчатых и равноосных частиц, и твердый алюминиевый раствор. В гомогенизированных сплавах формируются крупные частицы неправильной или пластинчатой формы длиной до 1 мкм, а также дисперсные выделения, однако их плотность значительно ниже. В негомогенизированных сплавах преобладают наноразмерные частицы, которые имеют пластинчатую форму (0,1–0,4 мкм) и равноосные частицы (0,03–0,06 мкм), с высокой пространственной плотностью, что способствует формированию мелкозернистой субструктуры и эффективно препятствует процессам полигонизации и рекристаллизации.

Таким образом, гомогенизационный отжиг снижает термическую стабильность сплавов, инициируя более ранний распад пересыщенного твердого раствора с выделением $Al_{20}Cu_2Mn_3$. Кроме того, длительная гомогенизация способствует образованию крупных частиц. В негомогенизированных сплавах частицы $Al_{20}Cu_2Mn_3$ отличаются дисперсностью, поэтому эффективнее подавляются процессы рекристаллизации.

Благодарности: исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №24-19-00064, https://rscf.ru/project/24-19-00064/

Литература

1. Белов Н. А., Черкасов С.О., Короткова Н. О., Цыденов К. А. Технологичность и эволюция структуры цилиндрических слитков сплава Al – 2 % Cu – 2 % Mn в процессе обработки давлением. Цветные металлы, 2023, 1, 77-82.

ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ ПОВЕРХНОСТИ БИОРЕЗОРБИРУЕМЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ РЕКОНСТРУКЦИИ КОСТНОЙ ТКАНИ НА ОСНОВЕ ФОСФАТОВ МАГНИЯ ГИДРОЛИТИЧЕСКОЙ КОНВЕРСИЕЙ В МОДЕЛЬНЫХ РАСТВОРАХ

Е.С. Климашина[1, 2], П.Е. Середенко[1], А.К. Пупанова[1], Ю.Р. Рассолова[1, 2], А.М. Мурашко[1, 2], В.И. Путляев[1, 2]

[1]*Химический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова, Москва*
[2]*Факультет наук о материалах МГУ имени М.В.Ломоносова, Москва*
klimashinaes@my.msu.ru

Разработка материалов для реконструкции костной ткани представляет собой одно из наиболее динамично развивающихся направлений современного биомедицинского материаловедения. Ключевая цель - создание биоматериалов с контролируемыми параметрами, способных эффективно замещать поврежденные участки кости и стимулировать восстановление их утраченных функций. Такой биоматериал должен выполнять функцию временного каркаса для адгезии клеток к поверхности, обладать высокой биосовместимостью, постепенно резорбироваться (растворяться) в организме, и при этом сохранять механическую прочность на протяжении процесса заживления.

Долгое время основное внимание исследователей было сосредоточено на керамике из фосфатов кальция, в частности, на гидроксиапатите ($Ca_{10}(PO_4)_6(OH)_2$, ГА) и трикальциевом фосфате ($Ca_3(PO_4)_2$, ТКФ), которые являются аналогами минерального компонента кости. Однако, такая керамика не соответствует современным требованиям регенеративной медицины в основном из-за недостаточно высокой скорости резорбции. Медленное растворение материала приводит к тому, что новая костная ткань формируется лишь на поверхности имплантата, “изолируя” его, что препятствует прорастанию кровеносных сосудов вглубь материала, нарушает полноценный остеогенез (процесс образования костной ткани) и создает риск повреждения тканей на границе с имплантатом.

Перспективной альтернативой видятся керамические материалы на основе фосфатов магния. Семейства фосфатов магния ($Mg_3(PO_4)_2$, MgP), фосфатов магния-натрия ($MgNaPO_4$, MgNaP) были предложены для создания рассасывающейся биокерамики для инженерии костной ткани. Проводимые исследования фосфатов магния показывают их более высокую способность к растворению *in vitro* и *in vivo* со скоростью, сопоставимой с образованием новой костной ткани организма. Керамика на основе фосфатов магния обладает повышенной прочностью за счет меньшего радиуса иона магния и, потому, более плотной и прочной кристаллической решеткой. С биологической точки зрения магний является важным элементом в организме человека, так как играет существенную роль в костном метаболизме, стабилизации ДНК и развитии скелета, а введение натрия будет способствовать улучшению биорезорбции. Несмотря на все перечисленные потенциальные преимущества и перспективы, керамические материалы на основе фосфатов магния, фосфатов магния-натрия – сравнительно мало изученная и разработанная область как в фундаментальных, так и в прикладных аспектах [1].

В качестве модельных растворов были выбраны различные водные среды (буферы) для поддержания определенного pH среды при гидролитической конверсии (модификации поверхности) и растворении керамических материалов на основе фосфатов магния. Ацетатный буфер с pH=5,6 был выбран как имитирующий слабокислую среду, которая может создаваться остеокластами при растворении костной ткани в организме. Ускоренное растворение при низких pH характерно для многих фосфатных материалов, так как кислота протонирует фосфат-ион, нарушая равновесие. Фосфатный буфер с pH=6 ближе к нейтральной среде (pH=7) по сравнению с ацетатным и содержит избыток фосфат-ионов, что, согласно принципу Ле Шателье, должно замедлять растворение ортофосфата магния. TRIS-буфер с pH=7,4 имитирует физиологическую нейтральную среду организма

(аналогичное значение pH), с химической точки зрения – это слабощелочная среда. Его часто используют в биохимических исследованиях именно из-за его инертности к биомолекулам. Для приближения условий к физиологическим, температура выдержки керамических материалов была выбрана близкой к температуре тела - 37–40 °C.

В результате проведенных исследований была отработана воспроизводимая методика синтеза однофазного ортофосфата магния $Mg_3(PO_4)_2$ твердофазным методом, на ее основе адаптированы и апробированы методики получения натрий-магниевых фосфатов, $MgNaPO_4$. Методами РФА, РЭМ выявлены закономерности фазовых превращений указанных фосфатов. Методом ТГ/ДТА исследована термическая стабильность синтезированных фосфатов и подобраны температуры спекания керамических образцов. Установлено, что ортофосфат магния термически стабилен вплоть до 1000 ^oC без фазовых переходов и разложения. $NaMgPO_4$ подвергается инконгруэнтному плавлению при 950–960 ^oC, а оптимальный температурный интервал обжига составляет 800–850 ^oC.

Поведение керамических образцов $Mg_3(PO_4)_2$ в водной среде демонстрирует, что на начальном этапе происходит резкое защелачивание раствора до pH=8,75 в случае компактного образца и до pH=11,23 в случае мелких гранул с большой площадью поверхности за 12-13 часов выдержки, которое уменьшается до pH ~ 9 уже к 120 часам (5 дней).

Изучено поведение керамических образцов на основе фосфатов магния в буферных средах, которое показывает, что гидролитическая конверсия является pH-зависимым процессом: в кислой среде (pH 5,6) доминирует растворение, при pH 6 – гидратация с образованием ньюберита и набуханием, при pH 7,4 – поверхностная перекристаллизация в ньюберит без изменения размеров.

Таким образом, полученные результаты доказывают, что гидролитическая конверсия материалов на основе фосфатов магния является pH-зависимым процессом, который можно направлять в сторону растворения (кислая среда) или кристаллизации гидратных фаз (нейтральная и слабощелочная среда). Это открывает возможность функционализации поверхности, регулирования скорости резорбции и остеоинтеграции керамики на основе фосфатов магния и перспективы для разработки новых биоматериалов и технологий для регенерационной медицины.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 26-29-20164, https://rscf.ru/project/26-29-20164/.

Литература

1 A.K. Pupanova, E.S. Klimashina, A.M. Murashko, Ya.Yu. Filippov, P.V. Evdokimov, V.I. Putlyaev. Solution synthesis of powder materials based on magnesium phosphates for stereolithographic 3D printing Russ. J. Inorg. Chem., 2025. 70(10) 1483-1492.

ОПТИМИЗАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ ЗОЛЬ-ГЕЛЬ СИНТЕЗА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ВЫСОКОПЛОТНОЙ МАГНИЙФОСФАТНОЙ КЕРАМИКИ

А.М. Мурашко[1, 2], Ю.Р. Рассолова[1, 2], В.Е. Исаева[1], Я.Ю. Филиппов[1, 3, 4], Е.С. Климашина[1, 2], В.И. Путляев[1, 2]

[1]*Факультет наук о материалах МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва*
[2]*Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва*
[3]*НИИ Механики МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва*
[4]*Университет МГУ-ППИ, Шеньчжень, Китай*
klimashinaes@my.msu.ru

Разработка резорбируемых керамических материалов для замещения костных дефектов является одной из приоритетных задач современного биоматериаловедения. В качестве альтернативы традиционным кальций-фосфатным составам, обладающим относительно низкой скоростью биодеградации, все больший интерес вызывают магнийфосфатные системы. Высокая биосовместимость, значительная роль ионов магния в остеогенезе, а также ускоренная резорбция в физиологической среде делают такие материалы перспективной основой для имплантатов нового поколения. Наряду с этим в литературе обсуждается потенциал магний-натрий-замещенных фосфатов, демонстрирующих повышенную растворимость. В данной работе проведено систематическое исследование влияния параметров золь-гель синтеза порошковых прекурсоров различных фосфатов магния-натрия по методу Печини на функциональные характеристики получаемой керамики.

Для обеспечения гомогенности получаемых порошковых прекурсоров и управления морфологией частиц систематически варьировались параметры синтеза, включая pH раствора и соотношение реагентов. Кроме того, для контроля фазового состава и реакционной способности порошков проводился подбор режимов помола и температуры предварительного обжига. Магнийфосфатная керамика была изготовлена путем формования прекурсоров методом одноосного прессования с последующей термообработкой. Установлено, что для составов, соответствующих эвтектическому соотношению фаз, относительная плотность керамики составляет до 97%. Механические испытания показали, что прочность при сжатии полученных керамических материалов достигает 150 МПа, а модуль Юнга для всех составов находится в диапазоне значений, допустимых для материалов костных имплантатов.

Исследования растворимости *in vitro* подтвердили, что магнийфосфатная керамика обладает повышенной скоростью резорбции, что делает ее оптимальной для применения в остеопластике. Полученные результаты показывают, что точная настройка параметров золь-гель синтеза, измельчения порошков и условий термообработки критически важна для достижения сочетания высокой плотности и контролируемой биодеградации, что необходимо для создания биорезорбируемой керамики нового поколения.

Исследование выполнено за счет средств гранта РНФ № 26-29-20164.

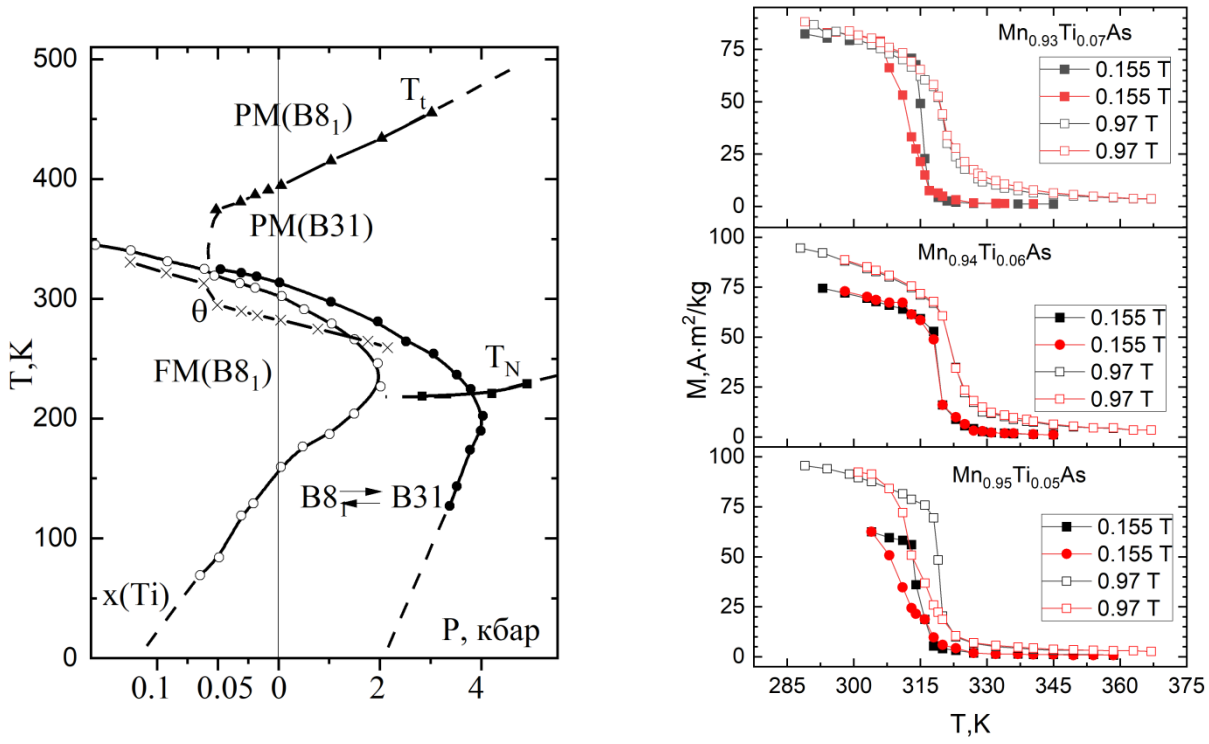
МАГНИТНЫЕ И МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ $Mn_{1-t}Ti_tAs$

Н.Ю. Ныркова[1], А.В. Головчан[1], О.Е. Ковалёв[1], И.Ф. Грибанов[1], А.П. Каманцев[1, 2], В.И. Митюк[3], Л.Н. Бутвина[1, 4]

[1]*Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина, Донецк*
[2]*Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва*
[3]*Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению, Минск*
[4]*Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Научный центр волоконной оптики им. Е.М. Дианова, Москва, Россия*
oleg_kovalev_2018@mail.ru

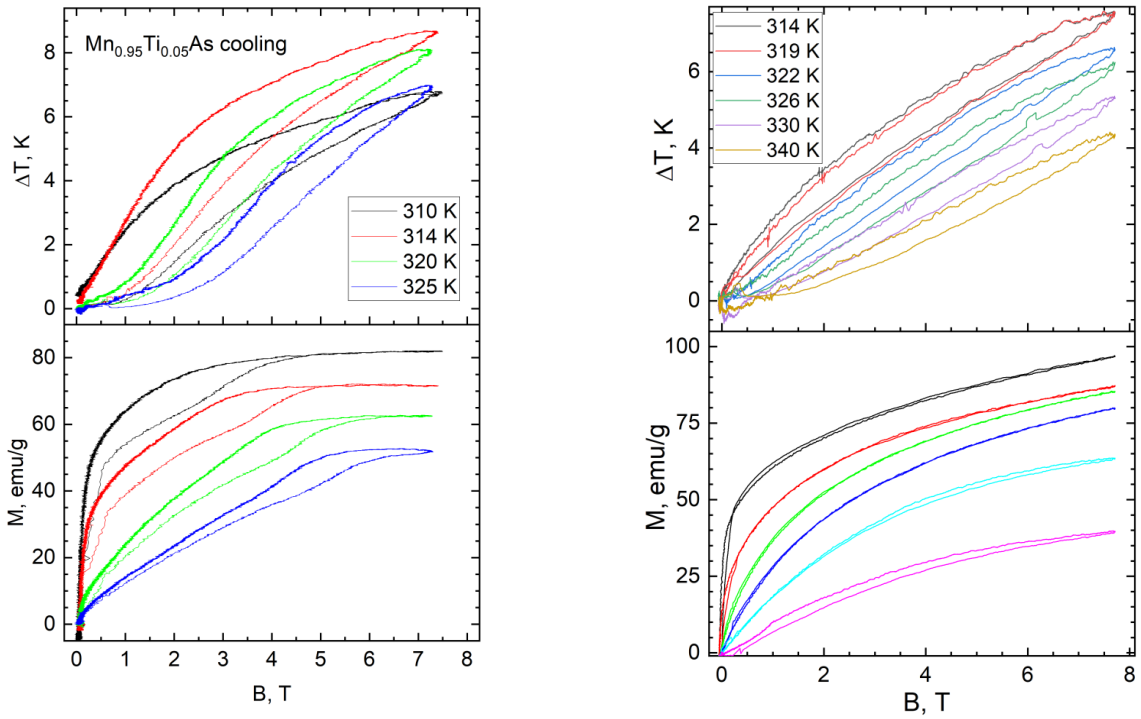
На протяжении многих десятилетий арсенид марганца привлекает внимание исследователей многообразием магнитных фаз и фазовых превращений (ФП). Однако, природа необычной последовательности фазовых превращений в MnAs до сих пор остается поводом для дискуссий. Интерес исследователей подогревается важными для практического применения свойствами этого вещества: значительным магниторезистивным эффектом, большой магнитострикцией и гигантским магнитокалорическим эффектом (МКЭ).

Рекордные значения МКЭ обусловлены сильной взаимосвязью магнитной и структурной подсистем, которая выражается в формировании резкого магнитоструктурного ФП из ромбической парамагнитной в гексагональную ферромагнитную фазу. Внешнее давления или легирование сильно влияют на температуру магнитоструктурного ФП, делая арсенид марганца «модельным» материалом для изучения ФП (Рис.1а). Титан, замещая марганец, расширяет кристаллическую решетку, выступая аналогом отрицательного давления [1] (Рис.1а). Это позволяет детально изучить окрестность тройной точки, в которой происходит слияние линий магнитного и магнитоструктурного ФП. В чистом MnAs эта точка скрыта в области отрицательных давлений.



а б

Рис.1. Совмещенные x-T и P-T диаграммы [1] (а) и температурные зависимости намагниченности (б) системы $Mn_{1-x}Ti_xAs$



а б

Рис.2. МКЭ в $Mn_{0.95}Ti_{0.05}As$ (а) и $Mn_{0.93}Ti_{0.07}As$ (б), измеренные прямым методом в импульсном магнитном поле 7,6 Тл.

В представленной работе исследовано влияние свойств ФП на величину МКЭ. Измерения МКЭ проводились бесконтактным методом с помощью волоконно-оптического датчика температуры [2] при охлаждении образца с обязательным контролем исходного состояния (парамагнитное). Согласно данным магнитных измерений (Рис. 1б) в диапазоне концентраций Ti от 5% до 7% род магнитного ФП изменяется с первого на второй, что согласуется с исчезновением критических полей индуцирования ферромагнитной фазы в импульсном магнитном поле (Рис.2). Величина МКЭ при этом уменьшается с ΔT = 9 К до 7,5 К. Такое изменение вызвано влиянием двух факторов. Во-первых, как показано в работе [3], структурный и магнитный вклады в изменение полной энтропии MnAs при магнитоструктурном ФП имеют разные знаки, соответственно при «отключении» структурного вклада МКЭ должен возрастать. Однако тут вступает в действие второй фактор – более плавное изменение магнитных характеристик при ФП второго рода приводит к уменьшению магнитного вклада в изменение полной энтропии системы.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-19-00587, https://rscf.ru/project/25-19-00587/

Литература

1. И.Ф. Грибанов, Э.А. Завадский, А.П. Сиваченко. Магнитные взаимодействия и фазовые превращения в кристаллах системы $Mn_{1-t}Fe_tAs$. ФНТ, 1982, 8, 939.
2. А.П. Каманцев, А.А. Амиров, Д.М. Юсупов, Л.Н. Бутвина, и др. Современные бесконтактные оптические методы измерения магнитокалорического эффекта. ФММ, 2023, 124, 1025.
3. В.И. Вальков, И.Ф. Грибанов, Б.М. Тодрис, А.В. Головчан, В.И. Митюк. Особенности формирования магнитокалорических явлений в системах $Mn_{1-t}Ti_tAs$ и $Mn_{1-x}Cr_xNiGe$ ФТТ, 2018, 6, 1113.

МОДИФИЦИРОВАННЫЙ СИНТЕЗ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ АЛЮМИНАТОВ НА ОСНОВЕ ЩЕЛОЧНОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ (Ca^{2+}, Sr^{2+}, Ba^{2+})

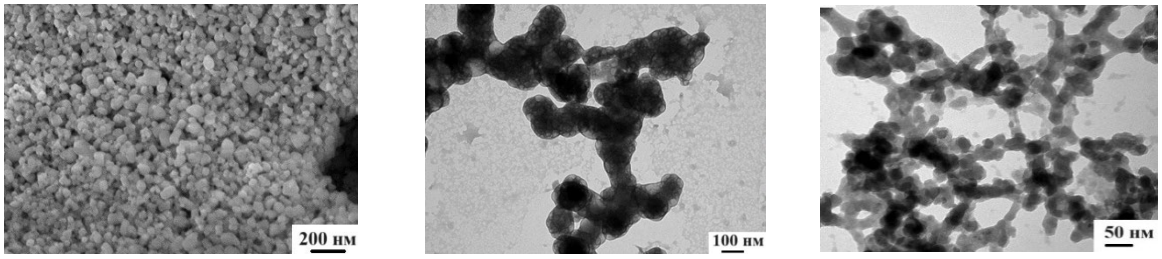
Л.О. Козлова, И.В. Козерожец, Ю.В. Иони, М.Г. Васильев

Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва
kozzllova167@gmail.com

Синтезу порошков оксидов металлов посвящено большое количество работ [1, 2]. Алюминаты на основе стронция, кальция и бария широко используются в различных отраслях промышленности: в космической, электротехнической, в машиностроение, а также медицине. Поиск последовательных, недорогих и подходящих способов получения высокодисперсных алюминатов на основе Ca^{2+}, Sr^{2+}, Ba^{2+} с воспроизводимыми свойствами является актуальной задачей.

Целью данной работы является модифицирование и поиск нового подхода к синтезу наноразмерных алюминатов на основе ЩЗЭ с заданными и воспроизводимыми свойствами на основе предложенного ранее метода пиролиза концентрированного раствора солей и углеродсодержащих прекурсоров [3].

На рисунке 1 представлены микрофотографии высокодисперсных алюминатов ($BaAl_2O_4$ (а), $SrAl_2O_4$ (б), $CaAl_2O_4$ (в)), полученных модифицированным золь-гель методом, который заключается в сжигании концентрированного водно-углеродного раствора солей металлов с различными прекурсорами. Схема модифицированного подхода представлена на рисунке 2.



а б в

Рис.1. Микрофотографии наноструктурированных алюминатов – $BaAl_2O_4$(а), $SrAl_2O_4$(б), $CaAl_2O_4$(в)

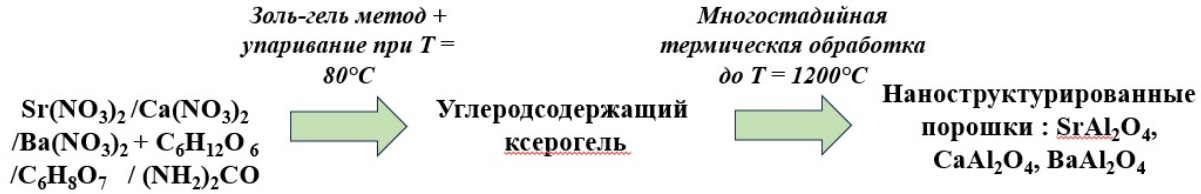


Рис. 2. Модифицированный метод синтеза алюминатов на основе щелочноземельных элементов

Данный подход к синтезу позволяет получать нанопорошки алюминатов с воспроизводимыми параметрами: изометрическая форма, средний размер частиц от 20 нм до 50 нм, насыпная плотность от 0,015±10% г/см^3 до 0,054±10% г/см^3.

Исследование выполнено при поддержке РНФ (project No. 25-23-01088)

Литература

1. I.V. Kozerozhets, S.V. Maksimov, Yu. V. Ioni, V.V. Avdeeva, Yu. D. Ivakin, L.O. Kozlova, A.A. Kholodkova, L.A. Arbanas, A.S. Popova, M.G. Vasil'ev. Synthesis of aluminum oxide and oxyhydroxide nanoparticles with tailored properties for advanced ceramic applications. Ceram. Int. 2026, 52, 5735-5744.
2. L.O. Kozlovaa, I.L. Voroshilov, Yu.V. Ionia, Yu.D. Ivakin, I.V. Kozerozhets, M.G. Vasiliev. Low-temperature Synthesis of Highly Dispersed Barium Aluminate. Russ. J. Inorg. Chem. 2024, 69, 1619–1625.
3. I.V. Kozerozhets, E.A. Semenov, L.O. Kozlova, Yu.V. Ioni, V.V. Avdeeva, Yu.D. Ivakin. Mechanism to Form Nanosized Oxides When Burning Aqueous-Carbon Salt Solutions. Mat. Chem. Phys. 2023, 309(3), 128387.

ВЛИЯНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ В АТМОСФЕРЕ АРГОНА НА МОРФОЛОГИЮ ПЛЕНОК $Bi_2Te_{2.7}Se_{0.3}$

А.И. Колпаков, А.П. Кузьменко, А.Д. Паньков

Юго-Западный государственный университет, Курск
artem.kolpakov.96@mail.ru

Теллурид висмута, легированный селеном ($Bi_2Te_{2.7}Se_{0.3}$) – один из наиболее эффективных термоэлектрических материалов n-типа вблизи комнатной температуры, остающийся перспективным в большинстве термоэлектрических элементов и устройств [1]. Тонкие пленки (ТП) этого соединения перспективны для микроохладителей и генераторов энергии [2, 3]. Большое влияние на электропроводность, теплопроводность и коэффициент Зеебека оказывает морфология ТП (шероховатость, размер зерен и т.д.) [4]. Факт того что пост-отжиг в инертной среде улучшает термоэлектрические свойства пленок достаточно хорошо изучен [5].

В данной работе проведен комплексный АСМ-анализ поверхности ТП $Bi_2Te_{2.7}Se_{0.3}$, осажденных на предварительно прогретую кремневую подложку, и исследовано влияние короткого (30 мин) отжига при 100 °C в аргоне на гранулометрический анализ ($d = d_{aver.} \pm \Delta d$), шероховатость ($R_a$ и R_q) и фрактальную размерность (D_f). Особое внимание уделено попытки интерпритировать наблюдаемые слабые изменения морфологии через представление о поверхностной дифузии и начальном фасетировании.

Тонкие пленки $Bi_2Te_{2.7}Se_{0.3}$ толщиной ~ 954 нм наносились на подложки из монокристаллического кремния (100) методом ВЧ МР. Подложки чистились хромовой смесью и плазмой, как это описывалось в опубликованной нами ранее работе [6]. Непосредственно перед осаждением подложки подвергались инфракрасному нагреву в течение 120 с с целью дегазации и улучшения адгезии поверхности. Рабочее давление составляло 4×10^{-3} Торр, расход аргона (Ar) – 0,7 л/ч, а мощность разряда – 70 Вт. Пост-отжиг выполнялся в рабочей камере МВУ ТМ-Магна Т сразу же после распыления, в потоке Ar при температуре 100 °C в течение 30 мин; нагрев и охлаждение происходило со скоростью ~ 4 °C/мин. Выбор данной температуры обусловлен технологическими особенностями установки.

Морфологию поверхности исследовали на атомно-силовом микроскопе (AIST-NT SmartSPM, с разрешением по Z – координате 30 пм) в полуконтактном режиме с использованием кантилеверов NSG30_SS (радиус закругления острия 2 нм). В работе использовались изображения на участках 5×5 мкм с разрешением 256×256 точек. Из АСМ-изображений с помощью программных пакетов Gwyddion и Digimizer рассчитывались: гранулометрический анализ ($d = d_{aver.} \pm \Delta d$), шероховатость ($R_a$ и R_q) и фрактальная размерность (D_f). На рис. 1 а и б приведены типичные АСМ-изображения поверхности до и после отжига на вставках I и II показаны профиль шероховатости и гранулометрический анализ. Результаты расчетов исследуемых параметров приведены в таблице 1.

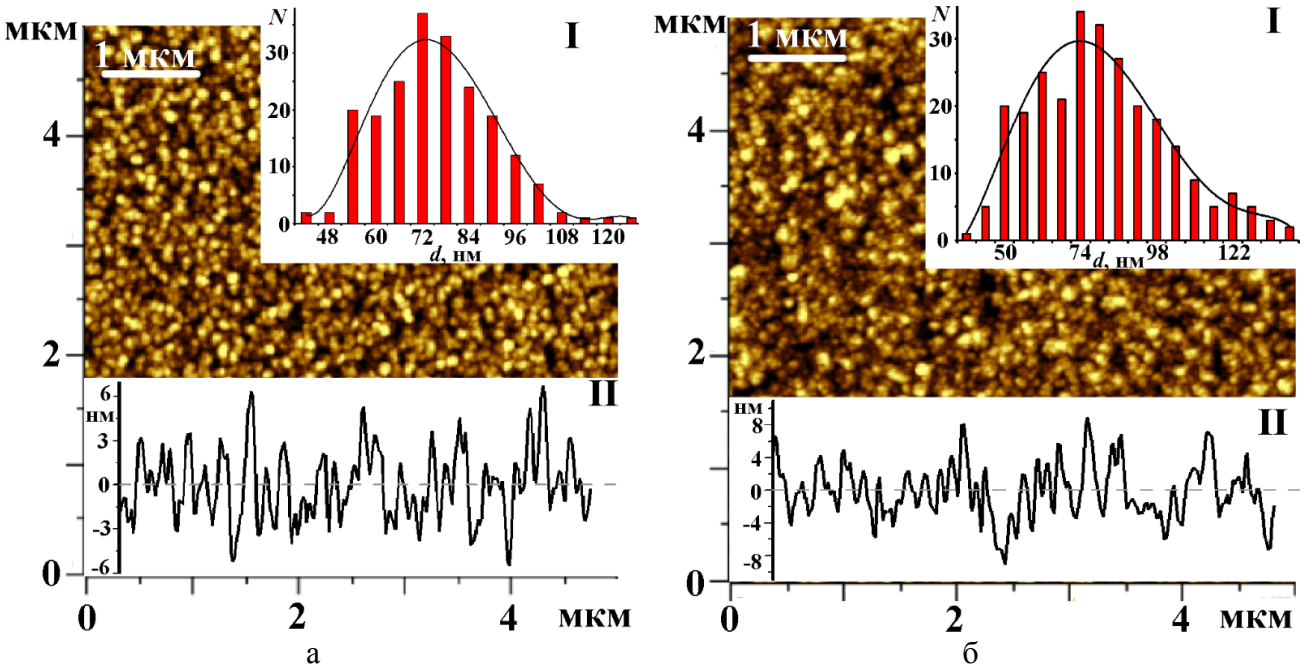


Рис. 1. АСМ-изображения поверхностей ТП $Bi_2Te_{2.7}Se_{0.3}$: а – без отжига; б – с отжигом. На вставках: I – гранулометрический анализ; II – профиль шероховатости

Таблица 1. Расчетные значения d, R_a, R_q и D_f

Параметры	d, нм	R_a, нм	R_q, нм^2	D_f
до отжига	72 ± 18	2.1	2.6	2.69
после отжига	74 ± 24	3	3.7	2.7

Средний латеральный размер незначительно увеличился, однако стандартное отклонение увеличилось (табл. 1). Полученные гистограммы (рис. 1, а и б, вставка I) фитированы нормальным близким к гауссовому распределением. Энергия активации объемной диффузии в Bi_2Te_3 достаточно велика (~ 1 эВ), в то же время поверхностная самодиффузия мала. Именно последняя и становится активной при 100 °С [7] и по нашему мнению отвечает за наблюдаемые морфологические изменения. Увеличение R_a и R_q при незначительном изменении d, указывает на развитость рельефа поверхности без существенного латерального роста кристаллитов. Согласно принципу магнетронного распыления, адатомы мигрирую по поверхности подложки до тех пор, пока не достигнут минимума энергии, тем самым возможно формируя зачаточные ступени и террасы высотой в несколько нанометров, что напрямую увеличивает амплитуду шероховатости. Поскольку перед напылением ТП был произведен ИК-нагрев подложки, который обеспечил высокую подвижность адатомов на стадии конденсации, что привело к однородной зереной структуре. Благодаря такой исходной микроструктуре последующий мягкий отжиг проявляется не в укрупнении зерен, а в их «огранке» поверхности. Полученные результаты согласуются с предположением о том, что при низкотемпературной обработке в инертной среде доминирующей стадией эволюции морфологии является именно поверхностная, а не объемная диффузия [7]. С практической точки зрения, возможность контролируемо увеличивать шероховатость, не меняя размер частиц, открывает перспективы для оптимизации электрических и тепловых транспортных свойств. Развитая ступенчато-террасовая поверхность способствует дополнительному рассеиванию фононов, что потенциально снижает решеточную теплопроводность без ухудшения электропроводности.

Пост-отжиг ТП $Bi_2Te_{2.7}Se_{0.3}$, осажденных на ИК-нагретую кремневую подложку, при 100 °С в течение 30 мин в атмосфере аргона не приводит к существенному изменению среднего латерального размера зерен (с 72 до 74 нм), однако вызывает увеличение R_a (с 2.1 до 3 нм) и R_q (с 2.6 до 3.7 нм^2) и росту дисперсии размера зерен (с ± 18 до ± 24 нм). Данные

результаты объясняются как результат начального изменения зерен из-за активации поверхностной диффузии. Фрактальный анализ показал себя относительно чувствительным инструментом для регистрации первичных морфологических эволюций, которые не фиксируются гранулометрией. Найденные закономерности могут быть положены в основу тонкой инженерии интерфейсных свойств микротермоэлектрических устройств.

Литература

1. A.V. Shevelkov, A.O. Polevik. Development of thermoelectric materials for mid-temperature applications: current state and prospects. Moscow University Chemistry Bulletin, 2024, 79 359–373.
2. I. Voloshchuk, A. Babich, S. Pereverzeva, D. Terekhov, A. Sherchenkov. Flexible thermoelectric generator fabricated by screen printing method from suspensions based on $Bi_2Te_{2.8}Se_{0.2}$ and $Bi_{0.5}Sb_{1.5}Te_3$. Journal of Central South University, 2023, 30 2906–2918.
3. H. Abe, M. Takashiri, S. Hara, T. Arai, N. Sasaki, S. Tanaka. Performance evaluation of flexible thermoelectric generator with Bi_2Te_3 thin-film. Applied Thermal Engineering, 2024, 248 123258.
4. N. Rawther, U. Rout, P.D.S. Kumar, R. Ramanathan, R.C. Mallik. Thermoelectric properties of sputter deposited Bi_2Te_3–PbTe multilayer thin films. Physica B: Condensed Matter. 2024, 673 415467.
5. S. Jeon, M. Oh, H. Jeon, S.D. Kang, H.K. Lyeo, S. Hyun, H. Lee. Microstructure evolution of sputtered Bi–Te films during post-annealing: phase transformation and its effects on the thermoelectric properties. Journal of The Electrochemical Society, 2011, 158(8) H808–H813.
6. А.П. Кузьменко, А.И. Колпаков, К.А. Матарыкин, В.В. Родионов, О.Н. Иванов, М.Н. Япрынцев. Структурные и морфологические особенности магнетронных пленок теллурида висмута n-типа проводимости ВЧ МР. Известия Юго-Западного государственного университета. Серия: Техника и технологии, 2025, 15(2) 113–131.
7. D. Teweldebrhan, V. Goyal, A.A. Balandin. Exfoliation and characterization of bismuth telluride atomic quintuples and quasi-two-dimensional crystals. Nano Lett., 2010, 10(4) 1209–1218.

МНОГОУРОВНЕВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ ШЕРОХОВАТОСТИ И ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ В ОБРАЗЦАХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ

Н.С. Кондратьев, К.А. Романов, П.А. Гладких, А.Н. Подседерцев, Л.А. Соломатин

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь
kondratev@pstu.ru

Механическая обработка металлов занимает важное место в современной промышленности, обеспечивая получение деталей различных форм с необходимыми физико-механическими свойствами. Несмотря на развитие альтернативных методов получения изделий из металлов и сплавов, основанных на аддитивных технологиях [1], традиционные технологические процессы: точение, фрезерование, сверление, обработка металлов давлением (прокатка, штамповка и волочение) сохраняют свою значимость благодаря высокой точности и универсальности [2]. В условиях роста требований к надёжности и долговечности изделий особое внимание уделяется формированию необходимых эксплуатационных свойств, многие из которых напрямую зависят от состояния их поверхности [3]. К числу наиболее значимых характеристик поверхности и приповерхностного слоя относятся шероховатость и остаточные напряжения, возникающие при обработке металлов и сплавов [4].

Шероховатость поверхности выступает концентратором напряжений у вершин микронеровностей и сокращает стадию зарождения усталостной трещины [5], снижая тем самым циклическую долговечность деталей. Кроме того, высокое значение шероховатости увеличивает эффективную площадь контакта со смазочно-охлаждающими жидкостями и ускоряет коррозионное поражение поверхности [6]. Остаточные напряжения также влияют на усталостную прочность, в частности, сжимающие напряжения тормозят распространение трещин, что повышает долговечность использования деталей [7]. Описание формирования шероховатости и остаточных напряжений особенно актуально при изготовлении изделий из труднообрабатываемых материалов, к которым относятся жаропрочные никелевые сплавы [8]. Данные материалы широко применяются, например, в авиационной промышленности для создания деталей, работающих в условиях повышенных температур, циклических нагрузок и агрессивных сред [9].

Экспериментальное определение параметров шероховатости и остаточных напряжений связано с высокими затратами времени и ресурсов, что обусловливает необходимость разработки и применения методов математического моделирования для описания их формирования и эволюции. В связи с влиянием состояния внутренней структуры материала на шероховатость и остаточные напряжения применение упрощённых эмпирических зависимостей оказывается недостаточным и возникает необходимость в использовании многоуровневых конститутивных моделей [10]. Явный учёт механизмов деформирования в моделях через внутренние переменные и наличие связи между масштабными уровнями позволяет адекватно описывать экспериментально наблюдаемую эволюцию структуры на мезоуровне и зависящие от неё эксплуатационные характеристики на макроуровне [11]. В отличие от макрофеноменологических подходов многоуровневые модели применимы для физически обоснованного описания поведения широкого класса материалов при различных условиях нагружения. Среди многоуровневых моделей выделяют несколько классов [10]: прямые, статистические и самосогласованные модели. В рамках прямых многоуровневых моделей имеется возможность явным образом учитывать топологию зеренной структуры с описанием кристаллографической анизотропии и механизмов скольжения на уровне отдельных зерен.

В работе применена прямая многоуровневая конститутивная модель с явным учётом зеренной структуры, с её помощью получены результаты описания формирования шероховатости свободной поверхности и остаточных напряжений в жаропрочном никелевом

сплаве Inconel 718 при одноосном растяжении и сжатии в условиях термомеханического нагружения. Представлены результаты моделирования формирования шероховатости в монокристалле жаропрочного никелевого сплава Inconel 718 с применением прямой многоуровневой конститутивной модели, в которой явным образом учитывается субзеренная структура. Для имитации нахождения монокристалла в объеме зерна он был погружен в упругопластическую матрицу с осредненными свойствами для сплава Inconel 718. Процессом деформирования матрицы с монокристаллом являлся изгиб, решение краевой задачи для которого было реализовано в коммерческом программном продукте Abaqus с внедренной многоуровневой моделью материала.

Исследования выполнены при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № FSNM-2026-0007).

Литература

1. А.С. Смоленцев, А.В. Березовский, Д.Н. Трушников, Г.Л. Пермяков, В.Е. Веселова, А.В. Шак, Е.А. Усольцев. Послойный синтез заготовок методом mig-pulse наплавки с использованием аустенитной металлопорошковой проволоки с азотом. Металлург, 2024, 1 85-90.
2. Y. Hou, D. Myung, J.K. Park, J. Min, H.-R. Lee, A.A. El-Aty, M.-G. Lee. A review of characterization and modelling approaches for sheet metal forming of lightweight metallic materials. Materials, 2023, 16 (2) 836.
3. Е.С. Шлыков, Т.Р. Абляз, В.Б. Блохин, К.Р. Муратов. Повышение качества изготовления изделий из жаропрочного никелевого сплава нового поколения с применением проволочно-вырезной электроэрозионной обработки. Обработка металлов (технология, оборудование, инструменты) 2025, 27(1) 34-47.
4. M.M. Barjesteh. Influence of surface roughness on the hIgh temperature/hIgh straIn low cycle fatIgue behavIor of nIckel-based superalloy rene® 80. Archives of Metallurgy and Materials, 2023, 68 (2) 507–516.
5. B.N.J. Persson. Surface roughness-induced stress concentration. Tribology Letters, 2023, 71(2) 66.
6. S. Chen, P. Yan, J. Zhu, Y. Wang, W. Zhao, L. Jiao, X. Wang. Effect of cutting fluid on machined surface integrity and corrosion property of nickel based superalloy. Materials, 2023, 16(2) 843.
7. X. Li, R. Gou, N. Zhang. Effect of force and heat coupling on machined surface integrity and fatigue performance of superalloy GH4169 specimens. Metals, 2024, 14 (5) 540.
8. V. Topuz, M. Ay, G. Basmacı. Prediction of nickel-based super alloy surface roughness in CNC end milling operation using connectionist models. Scientific Research and Essays, 2011, 6(28) 5976-5985.
9. G. Gudivada, A.K. Pandey. Recent developments in nickel-based superalloys for gas turbine applications. Journal of Alloys and Compounds, 2023, 963 171128.
10. П.В. Трусов, А.И. Швейкин, Н.С. Кондратьев, А.Ю. Янц. Многоуровневые модели в физической мезомеханике металлов и сплавов: результаты и перспективы. Физическая мезомеханика, 2020, 23(6) 33-62.
11. Д.С. Безверхий, Н.С. Кондратьев, Э.Р. Шарифуллина. Многоуровневая модель для описания динамической рекристаллизации алюминиево-магниевого сплава. Физика металлов и металловедение, 2026, 127 (2) 226-235.

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРЫ И ФАЗОВОГО СОСТАВА НА ДЕФОРМАЦИОННУЮ СПОСОБНОСТЬ МАГНИТОТВЕРДЫХ СПЛАВОВ СИСТЕМЫ Fe-Cr-Co

Г.Ф. Корзникова

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
korznikova@anrb.ru

Сплавы Fe-Cr-Co обладают хорошим сочетанием достаточно высоких магнитных свойств с коррозионной стойкостью, прочностью, пластичностью, относительно низкой стоимостью из-за невысокого содержания дорогостоящего кобальта и отсутствия никеля (в сравнении с Fe-Co-V, ЮНДК и РЗМ-сплавами). Кроме того, в отличие от широко используемых в настоящее время магнитных сплавов с РЗМ, сплавы Fe-Cr-Co имеют более высокую точку Кюри, что обеспечивает лучшую термостабильность в широком интервале температур эксплуатации. В связи с этим сплавы Fe-Cr-Co не теряют своей практической значимости и в настоящее время продолжается их активное исследование.

Сплавы системы Fe-Cr-Co относятся к группе деформируемых магнитотвердых сплавов дисперсионно-твердеющего класса. Деформация этих сплавов обычно осуществляется при температурах выше 800°С, а высококоэрцитивное состояние в них формируется за счет распада α- твердого раствора при термомагнитной обработке и образования модулированной структуры, состоящей из когерентно связанных упорядоченных выделений $\alpha 1$ фазы в $\alpha 2$ матрице ($\alpha 1 + \alpha 2$). При этом фаза $\alpha 1$ является ферромагнитной и обогащена в равновесном состоянии железом и кобальтом, а фаза $\alpha 2$ является парамагнитной и обогащена хромом. Существующие технологии получения постоянных магнитов из этих сплавов, в том числе с применением традиционных процессов прессования, прокатки, ковки в сочетании с термической и термомагнитной обработкой в последнее время все меньше справляются с задачами получения заданного высокого уровня механических и эксплуатационных свойств в изделиях ответственного назначения. Обработка металлов с применением интенсивной пластической деформации является одним из наиболее передовых, ресурсосберегающих и высокопроизводительных способов производства заготовок деталей, обеспечивающих высокий уровень механических и эксплуатационных свойств.

Важнейшим вопросом остается повышение технологической пластичности сплавов Fe-Cr-Co, которую, как известно, можно поднять за счет формирования мелкозернистой структуры. Ранее полученные результаты позволили построить диаграммы рекристаллизации и установить рациональные температурно - скоростные режимы деформирования сплавов 25Х15К и 30Х8К с 15 и 8 % Со соответственно. Проведен анализ сложных взаимосвязей между деформируемостью магнитотвердых сплавов Fe-Cr-Co, термомеханическими режимами их формоизменения, характеристиками напряженно-деформированного состояния и изменениями их структуры и свойств.

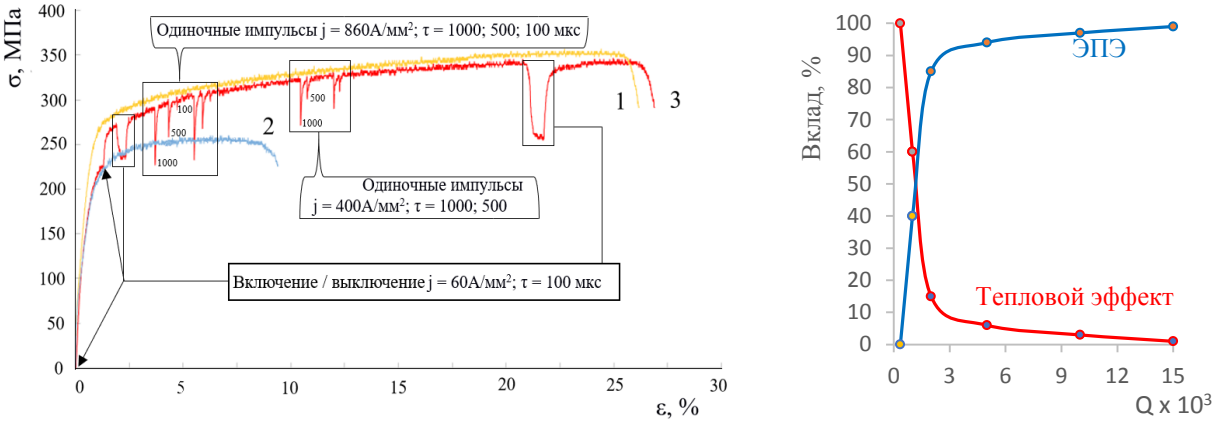
Показано, что путем деформационно-термической обработки можно реализовать переход от структурного состояния, которое характеризуется низкой прочностью в сочетании с хрупкостью к структуре, обеспечивающей сверхпластичность за счет формирования соответствующего фазового состава, морфологии и размера зерен.

ПРИМЕНЕНИЕ ЭЛЕКТРОПЛАСТИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА ДЛЯ ФОРМООБРАЗОВАНИЯ ПОЛУФАБРИКАТОВ ТИТАНОВЫХ ИМПЛАНТАТОВ

О.Е. Корольков, В.В. Столяров

Институт машиноведения им. А.А. Благонравова РАН, Москва
41zh1k@mail.ru

Электропластический эффект (ЭПЭ) – явление, при котором наблюдается снижение сопротивления металла деформации, а также улучшение его пластичности под влиянием электрического тока высокой плотности [1]. Одним из направлений практического применения ЭПЭ является обработка металлов давлением (ОМД) медицинских титановых ортопедических имплантатов с использованием сверхбыстрого нагрева импульсным током вместо традиционного длительного высокотемпературного нагрева в печи. Физической основой нового подхода является комбинация теплового и ЭПЭ эффектов (рис.1).



а б

Рис.1. Влияние режимов тока при растяжении (а) и скважности (б) на вклад теплового и ЭП эффектов: 1 – без тока; 2 – j = 60 А/мм2; τ = 100 мкс; Q = 10; 3 – j = 60 А/мм2; τ = 100 мкс; Q = 10 и j = 860 А/мм2; τ = 100, 500, 1000 мкс

Апробация метода выполнялась на крупнозернистом (КЗ) титане (Grade 4), микрозернистом сплаве (ВТ6) и ультрамелкозернистом (УМЗ) чистом титане (ВТ1-0) в условиях промышленного производства имплантатов на предприятии-изготовителе.



а б в

Рис.2. Фигурная крючковидная ключичная пласина (а) по стандартной технологии (900 °С), (б) изгиб с током (350 °С), (в) готовый имплантат, согнутый с током (б).

Разработанная и запатентованная технология [2] позволила уменьшить температуру процесса гибки (с 900 до 350 °С), исключить длительную операцию шлифовки для удаления окалины

(≈30 мин) и снизить себестоимость производства для имплантатов из сплава ВТ6 (Рис.2) и Grade 4 (Рис.3).

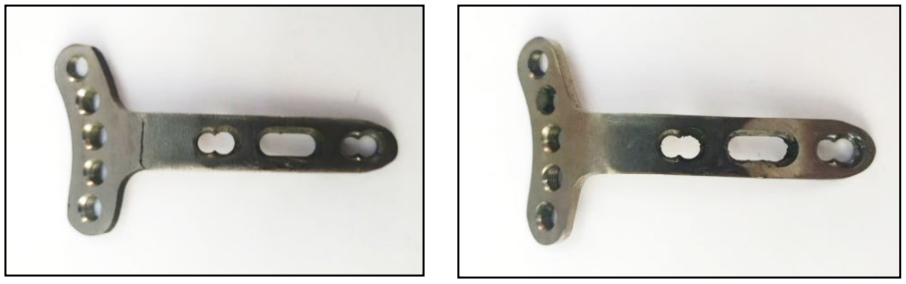


а б

Рис. 3. Малая угловая пластина без окалины (а) и готовые имплантаты, согнутые с током (б)

При этом в микроструктуре сохраняется размер зерен, поскольку в процессе ОМД $T_{деф} < T_{рекр.}$ [3]. Особенно привлекателен такой подход к изготовлению имплантатов из материалов с УМЗ и наноструктурой.

Известно, что пластичность металлов зависит от скорости деформации. В ходе исследований было установлено, что при использовании импульсного тока возможно увеличение скорости деформации сплава ВТ6, что позволяет уменьшить время технологической операции ОМД без образования трещин (Рис.4).



а б

Рис. 4. Полуфабрикаты ладонных пластин после испытания на изгиб: а – без тока (с трещиной); б – с импульсным током (без трещины).

В качестве перспективного материала для изготовления имплантатов особый интерес представляет УМЗ чистый титан, поскольку по прочности он не уступает сплаву ВТ6, но выигрывает в биосовместимости за счет отсутствия токсичных легирующих компонентов [4].



Рис. 5. Согнутый с током плечевой стержень из УМЗ ВТ1-0

Основной недостаток УМЗ титана заключается в низкой деформируемости в холодном состоянии, а высокий нагрев приводит к рекристаллизации и снижении прочностных

свойств. При использовании импульсного тока открывается возможность деформации УМЗ титана при температуре, ниже начала процесса рекристаллизации (Рис. 5).

Механические свойства УМЗ ВТ1-0 после деформации с током сохраняются, что было ранее продемонстрировано на УМЗ Grade 4 [3].

Таким образом, использование деформации с током позволяет снизить себестоимость производства имплантатов из КЗ Grade 4 и ВТ6. Снижение температуры деформации при использовании тока обеспечивает формование УМЗ ВТ1-0 без рекристаллизации, что открывает возможность производства имплантатов из равного по прочности, но более биосовместимого материала, чем титановый сплав ВТ6.

Работа выполнена за счет средств Государственного задания, код (шифр) научной темы, присвоенной учредителем (организацией)-FFGU-2026-0003

Литература

1. Ю.В. Баранов, О.А. Троицкий, Ю.С. Авраамов, А.Д. Шляпин. Физические основы электроимпульсной и электропластической обработок и новые материалы. М.: МГИУ, 2001. 844 с.
2. О.Е. Корольков, М.А. Пахомов, В.В. Столяров. Способ электропластического формования деталей из титановых сплавов. Патент РФ 2781513 С1, 12.10.2022.
3. O.E. Korolkov, V.V. Stolyarov. Effect of Electric-Current-Assisted Deformation on the Microstructure and Mechanical Properties of Biomedical Grade 4 Titanium with Various Initial Structures. Russian Metallurgy (Metally). 2026, 1 132-139. DOI 10.1134/S0036029526700205
4. Т.С. Петровская, В.П. Шахов, В.И. Верещагин, В.П. Игнатов. Биоматериалы и имплантаты для травматологии и ортопедии: монография. Томск: Издательство Томского политехнического университета, 2011. 307 с.

МИКРОВОЛНОВОЕ РЕАКЦИОННОЕ СПЕКАНИЕ КЕРАМИЧЕСКИХ ЛЮМИНОФОРОВ Al_2O_3–Ce:YAG ДЛЯ СВЕРХЪЯРКОГО ТВЕРДОТЕЛЬНОГО ОСВЕЩЕНИЯ

Д.Ю. Косьянов[1], А.А. Ворновских[1], А.П. Завьялов[1], К.И. Рыбаков[2], А.А. Образцов[3], С.С. Балабанов[4], Джанг Ли[5]

[1]*Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия*
[2]*Институт прикладной физики им. А.В. Гапонова-Грехова РАН, Нижний Новгород, Россия*
[3]*Общество с ограниченной ответственностью "НПО "Телеметрия", Калуга, Россия*
[4]*Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девятых РАН, Нижний Новгород, Россия*
[5]*Шанхайский институт керамики КАН, Шанхай, Китай*
kosianov.diu@dvfu.ru

Микроволновое реакционное спекание при 24 ГГц с использованием излучения гиротрона применено как быстрый способ уплотнения при изготовлении композитных керамических люминофоров Al_2O_3–Ce:YAG для сверхъяркого твердотельного освещения.

Композитные керамики, содержащие 30 вес.% Al_2O_3 и 0.2 ат.% Ce:YAG, получены реакционным спеканием порошковых смесей Al_2O_3–Ce:Y_2O_3 с использованием SiO_2 в качестве спекающей добавки. Образцы характеризовались однородной мелкозернистой двухфазной микроструктурой со средним размером зерен 3.1 мкм (Al_2O_3) и 4.1 мкм (Ce:YAG), относительной плотностью 98.8%, общим пропусканием 32.2% при длине волны λ=800 нм, и внешней квантовой эффективностью 64%.

Проведена оценка потенциала применения керамических люминофоров в конфигурации белого светодиода при использовании образца толщиной 0.4 мм. Показано, что при возбуждении синим светодиодом световой поток монотонно возрастает с увеличением тока и достигает 2173 лм при 2500 мА, сохраняя при этом стабильные значения коррелированной цветовой температуры в диапазоне 4070–4210 K. Полученные результаты демонстрируют перспективность микроволнового реакционного спекания как техники синтеза керамических конвертеров цвета Al_2O_3–Ce:YAG для высокомощных твердотельных систем освещения.

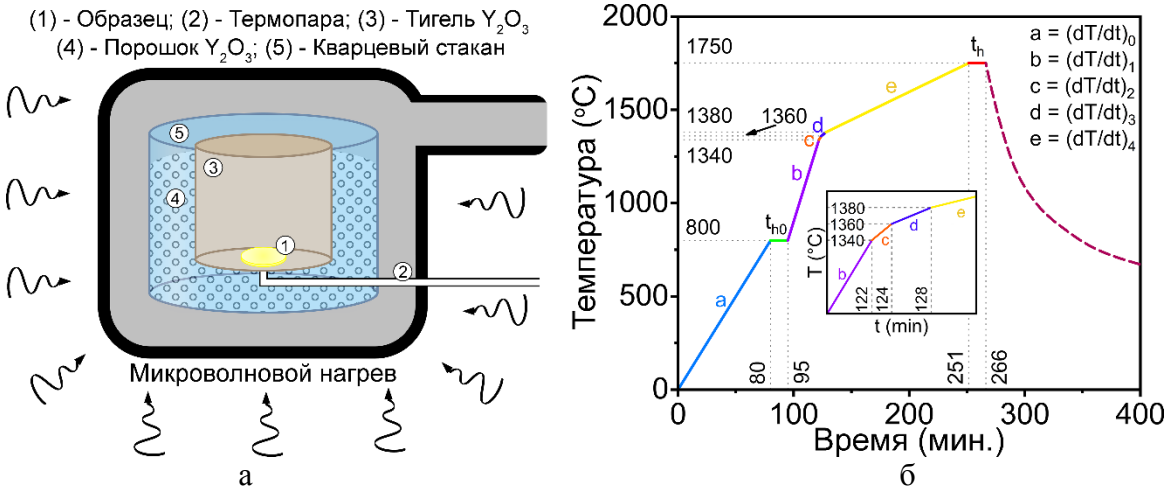


Рис. 1. Схематическое изображение (вид сбоку) теплоизоляционного узла для микроволнового реакционного спекания (а), и температурно-временной профиль спекания (б) композитных керамик 30 вес.% Al_2O_3–0.2 ат.% Ce:YAG

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (Проект № 25-43-02202).

ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКОЙ ЭНЕРГИИ МЕЖДУ ПОДРЕШЁТКАМИ Pt_3Al ПРИ ВОЗБУЖДЕНИИ В ЗАПРЕЩЁННОЙ ЗОНЕ ФОНОННОГО СПЕКТРА

А.С. Кочкин[1, 2], М.Д. Старостенков[1], К.А. Теников[1]

[1] *Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, Барнаул*
[2] *Алтайский государственный университет, Барнаул*
andre211@mail.ru

При гармоническом нагружении кристалла на частоте из запрещённой зоны фононного спектра линейный отклик затухает уже у поверхности. Но выше определённой амплитуды в решётке зарождаются дискретные бризеры и солитоноподобные волны, уносящие энергию в глубь образца. Это явление называют нелинейной супратрансмиссией (НСТ) [1, 2]. В интерметаллиде Pt_3Al (сверхструктура $L1_2$) подрешётки различаются по массе почти в семь раз (mPt/mAl ≈ 7,2). Такой контраст разводит акустические и оптические ветви, оставляя между ними широкую запрещённую зону, благоприятную для щелевых бризеров и НСТ [3]. Открытым оставался вопрос, как закачиваемая энергия делится между платиновой и алюминиевой подрешётками. Ниже он решён прямым молекулярно-динамическим расчётом: распределение энергии прослежено по всей плоскости параметров возбуждения «частота — амплитуда».

Модель строилась в пакете LAMMPS. Брался удлинённый вдоль оси [001] блок Pt_3Al из 12 × 12 × 500 кристаллических ячеек (288 тыс. атомов, период решётки 3,92 Å), а взаимодействие атомов описывалось потенциалом метода погружённого атома (EAM) [4]. Спектр колебаний, рассчитанный по динамической матрице, разорван щелью 5,40–8,65 ТГц: платина доминирует в акустических ветвях под щелью, алюминий — в оптических над ней. Накачку создавал верхний слой, смещаемый по закону $z = z_0 + A\,sin\left(\frac{2\pi t}{\tau}\right)$. Через 5 пс его фиксировали и далее 50 пс прослеживали свободную эволюцию в NVE-ансамбле, стартуя от температуры порядка 0 K. Частоту (период от 0,1166 до 0,1544 пс, то есть 6,48–8,58 ТГц внутри щели) и амплитуду (0,06…0,30 Å с шагом 0,03 Å) накачки перебирали независимо, охватив 81 сочетание. Мерой асимметрии деления энергии служило отношение средних кинетических энергий подрешёток $R = \frac{\langle KE\rangle_{Pt}}{\langle KE\rangle_{Al}}$.

По этому отношению карта режимов (рис. 1) распадается на три области. В сорока режимах энергия удерживается преимущественно на тяжёлой подрешётке (R = 1,2–4) — чего и следует ждать от контраста масс. В тридцати четырёх перевес алюминия оказывается временным: сразу после снятия накачки лёгкая подрешётка держит R < 1, но спустя 10–44 пс платина снова забирает бóльшую долю энергии. И лишь в семи режимах инверсия не исчезает — R остаётся ниже единицы вплоть до конца счёта (квазистационарная стадия 30–55 пс).

Пять из семи устойчивых режимов сгущаются в два кармана у краёв зоны, а остальные два лежат изолированно. Первый примыкает к оптическому краю (8,28 и 8,58 ТГц) и возникает уже при наименьшей амплитуде A = 0,06 Å, то есть ниже порога НСТ (Athr ≈ 0,09 Å [5]): частота накачки попадает на оптические ветви алюминия, и лёгкая подрешётка набирает энергию избирательно, без рождения уединённых волн. Второй карман лежит у акустического края (6,48 ТГц), уже за порогом, и сопровождается ритмичной перекачкой энергии между подрешётками. В спектре R(t) на квазистационарной стадии видна единственная линия, отвечающая периоду обмена около 17 пс, — признак нескольких долгоживущих щелевых мод. Профиль R(z) вдоль образца показывает, что инверсия держится лишь в приповерхностном слое у источника, тогда как в объём энергию уносит платина.

Деление энергии по подрешёткам образует самостоятельную степень свободы нелинейной динамики Pt_3Al и не вытекает из одного лишь порога НСТ. Особенно

показательна подпороговая инверсия у оптического края: лёгкую подрешётку удаётся избирательно подпитывать, не доводя систему до супратрансмиссии, что открывает путь к локальному управлению энерговкладом в упорядоченных сплавах. Естественным продолжением выглядит анализ зависимости полученной картины от кристаллографического направления накачки — для уединённых волн НСТ влияние анизотропии кристалла уже установлено [6].

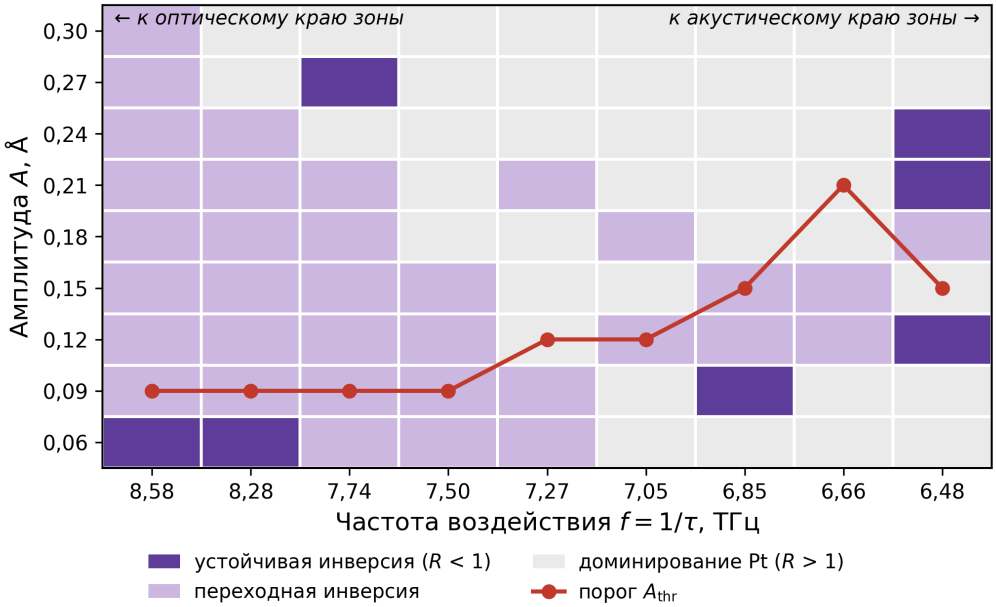


Рис. 1. Распределение кинетической энергии по подрешёткам Pt_3Al на плоскости «частота воздействия f — амплитуда A»: устойчивая инверсия (R < 1), переходная инверсия и доминирование платины (R > 1); красная линия — пороговая кривая супратрансмиссии Athr(f)

Литература

1. F. Geniet, J. Leon. Energy Transmission in the Forbidden Band Gap of a Nonlinear Chain. Phys. Rev. Lett., 2002, 89 134102.
2. С.В. Дмитриев, Е.А. Корзникова, Ю.А. Баимова, М.Г. Веларде. Дискретные бризеры в кристаллах. Успехи физических наук, 2016, 186(5) 471-488.
3. P.V. Zakharov, M.D. Starostenkov, E.A. Korznikova, A.M. Eremin, I.S. Lutsenko, S.V. Dmitriev. Excitation of Soliton-Type Waves in Crystals of the A_3B Stoichiometry. Phys. Solid State, 2019, 61(11) 2160-2166.
4. X.W. Zhou, R.A. Johnson, H.N.G. Wadley. Misfit-Energy-Increasing Dislocations in Vapor-Deposited CoFe/NiFe Multilayers. Phys. Rev. B, 2004, 69(14) 144113.
5. А.С. Кочкин, М.Д. Старостенков, К.А. Теников. Частотная зависимость порога нелинейной супратрансмиссии при гармоническом возбуждении в интерметаллиде Pt_3Al. Письма в ЖТФ, 2026, 52(16) 40-44.
6. P.V. Zakharov, E.A. Korznikova, A.A. Izosimov, A.S. Kochkin. The Influence of Crystal Anisotropy on the Characteristics of Solitary Waves in the Nonlinear Supratransmission Effect: Molecular Dynamic Modeling. Computation, 2023, 11(10) 193.

СИНТЕЗ МЕДЬ/ГРАФЕНОВЫХ ЧАСТИЦ И ВОДОРОДНЫХ ДОМЕНОВ В ПЛАЗМЕННОЙ СТРУЕ: МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА

Крылова К.А.[1], Рожнова Е.А.[1], Шавелкина М.Б.[2], Баимова Ю.А.[1]

[1]*Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа*
[2]*Объединенный институт высоких температур РАН, Москва*
bukreevakarina@gmail.com

Стремительное развитие микроэлектроники и водородной энергетики требует создания новых материалов с уникальными свойствами. Современные требования к материалам для микроэлектроники стимулируют поиск легких и эффективных теплоотводов. Композиты на основе меди и графена (Cu/графен) являются перспективной альтернативой традиционной меди благодаря высокой теплопроводности и улучшенным механическим свойствам. Однако их финальные характеристики критически зависят от условий синтеза и морфологии получаемой структуры. Параллельно с этим, актуальной задачей является разработка безопасных методов хранения водорода. Перспективным подходом к решению обеих задач является плазмохимический синтез, позволяющий формировать in-situ гибридные. В данной работе представлены результаты комплексного исследования процессов формирования гибридных углеродных структур в условиях плазменной струи, полученные методами молекулярно-динамического моделирования (МД).

Моделирование взаимодействия наночастицы Cu (диаметр 0,7 нм) с графеновой чешуйкой (ГЧ) диаметром 2,6 нм осуществлялось методом МД в широко используемой программе LAMMPS при 2500 К и скоростях соударения частицы с графеном от 1 до 9 км/с как с выпуклой, так и с вогнутой стороны листа. Отметим, что условия моделирования соответствовали параметрам плазмохимического синтеза Cu/графен частиц [1,2]. В ходе моделирования взаимодействия Cu с графеном установлено, что при столкновении частицы с графеновой чешуйкой реализуются три типа взаимодействия: прилипание, отталкивание и разрыв. Пороговые значения скоростей зависят от кривизны поверхности. Прилипание наблюдается при скоростях менее 1 км/с. Разрыв ковалентных связей графена при ударе о вогнутую сторону происходит при достижении скоростей 7 км/с, в то время как для разрыва выпуклой стороны требуется энергия удара, соответствующая скорости не менее 9 км/с. Это свидетельствует о том, что выпуклая структура графена обладает большей жесткостью и лучше гасит удар.

МД моделирование водородных доменов в графеновых структурах так же осуществлялось в программе LAMMPS при 2000 К. Установлено, что ключевую роль играет адгезия краевых графеновых слоев, формирующих «механические замки», которые предотвращают десорбцию газа из межслоевого пространства. Эффективность удержания водорода зависит от количества слоев: трёхслойные структуры теряют менее 5% водорода, тогда как девятислойные — до 40%. В структурах с более чем десятью слоями формирование доменов затруднено из-за высокой жесткости и неполной адгезии слоев.

Литература

1. M.B. Shavelkina, D.I. Kavyrshin, R.K. Amirov, V.F. Chinnov, G.M. Dzagnidze, A.I. Ivanov. Dc erosion jets for the production of composite graphene particles. Physics of Plasmas, 2023, 30 (2).
2. M.B. Shavelkina, K.A. Krylova, D.I. Kavyrshin, J.A. Baimova. Syntheses of the Cu/graphene composite nanoparticles in plasma jets: experiment and simulation. Applied Surface Science, 2025, 689, 162523.

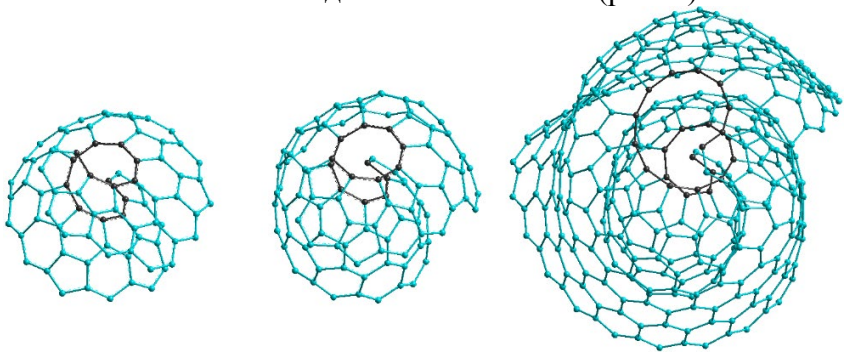
ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ УГЛЕРОДНЫХ СВИТКООБРАЗНЫХ НАНОСТРУКТУР

Е.А. Кулакова[1, 2], **В.А. Грешняков**[1, 2]

[1] *Челябинский государственный университет, Челябинск*
[2] *Балтийский федеральный университет им. Иммануила Канта, Калининград*
lelya.kulakova.2003@yandex.ru

Углеродные наноструктуры на основе sp^2-гибридизованных атомов могут иметь широкий ряд свойств за счет существования различных структурных модификаций [1, 2, 3]. Наноструктуры в виде фуллеренов, нанотрубок и графеновых слоев могут применяться при разработке литий-ионных батарей, суперконденсаторов и датчиков благодаря своим механическим и электронным свойствам [4]. Кроме того, получены свиткообразные наноструктуры, которые имеют более развитую удельную поверхность по сравнению с нанотрубками, а также высокую адсорбционную способность и могут быть интеркалированы атомами других веществ [5]. До сих пор не определены причины образования свиткообразных наноструктур наиболее простых типов, полученных и рассчитанных другими авторами, а полное число всевозможных структур свиткообразных соединений еще не установлено, поэтому данное исследование посвящено расчету структуры различных типов углеродных наносвитков.

В ходе работы для расчетов моделей наноструктур был использован метод молекулярной механики ММ4, поскольку данный метод обеспечивает достаточную точность воспроизведения структурных параметров. Были рассмотрены два различных варианта построения спиралеобразных графеновых структур. При формировании онионоподобного наносвитка наличие пятиугольных колец, образующихся вокруг продольной оси ониона может инициировать возникновение спиральной морфологии. На рисунке 1 приведена структура этого наносвитка, в котором черным цветом выделены атомы, составляющие спиральный элемент. В процессе роста структуры число звеньев спирали увеличивается при увеличении числа оболочек в онионоподобном наносвитке (рис. 1).

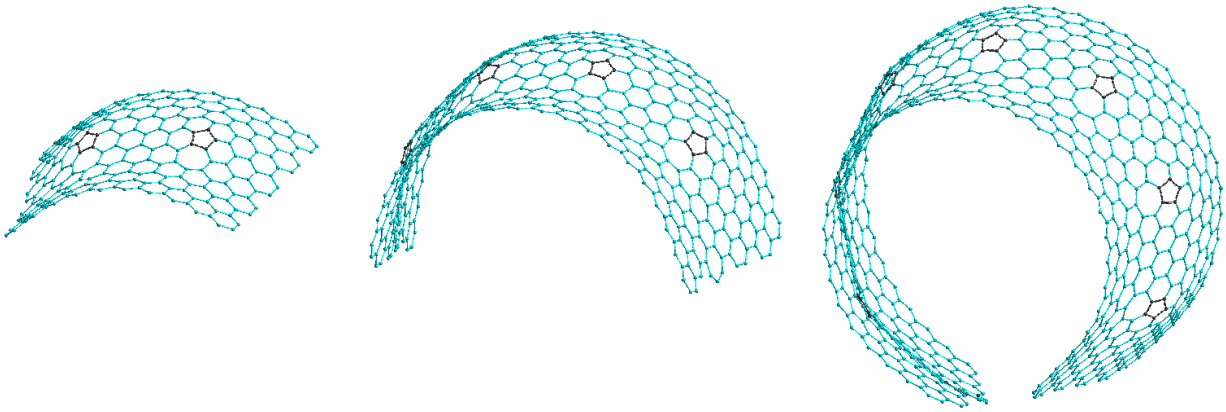


(а) (б) (в)

Рис. 1. Структура спиралевидного ониона на различных стадиях формирования

Также к свертке графеновой ленты в свиток может приводить появление дефекта 5-7. Установлено, что в случае формирования графеновой ленты с индексами (5,0) с равноудаленными топологическими дефектами 5-7. На рисунке 2 приведены три этапа роста графеновой ленты с дислокациями 5-7, содержащей 232, 457 и 758 атомов соответственно. Графеновая лента с восемью дефектами является предельным случаем, в котором структура приобретает максимальный изгиб, но все еще не подвергается сильной скрутке, приводящей к формированию структуры свитка (см. рис. 2в и рис. 3а). Наличие более восьми топологических дефектов приводит к скручиванию ленты в спираль. Дальнейший рост

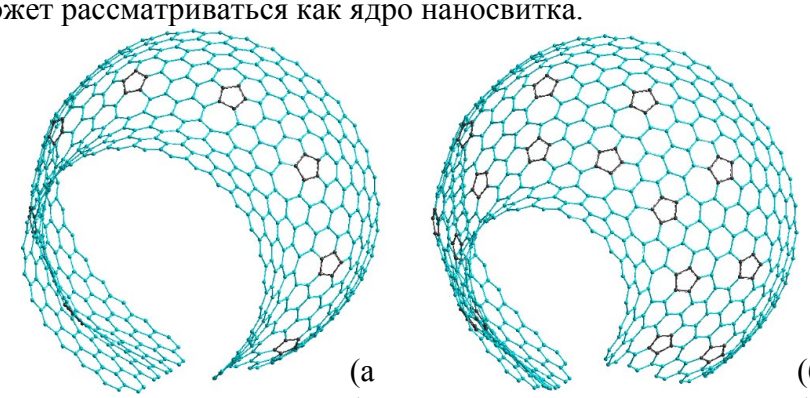
углеродного наносвитка может происходить без наличия топологических дефектов во внешней оболочке этого наносвитка.



(а) (б) (в)

Рис. 2. Геометрически оптимизированная структура графеновых лент с различным числом топологических дефектов 5-7: (а) 2; (б) 4; (в) 8

Кроме того, также возможен рост графеновой ленты с топологическими дефектами 5-7, формирующимися в два ряда, как показано на рисунке 3б. За счет удаления целого ряда sp^2-гибридизированных атомов и дальнейшей сшивки в результате геометрической оптимизации структура обретает «фуллереноподобную» форму, которая достигается из-за внедрения в графеновый слой пятичленных колец, но в отличие от фуллерена не является замкнутой и может рассматриваться как ядро наносвитка.



(а) (б)

Рис. 3. Структура изогнутых графеновых лент, содержащих восемь (а) и шестнадцать (б) топологических дефектов 5-7

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант РНФ № 25-72-31032).

Литература

1 E.A. Belenkov, V.A. Greshnyakov. Classification of structural modifications of carbon. Physics of the Solid State, 2013, 55(8) 1754-1764.
2. E.A. Belenkov, V.A. Greshnyakov. Modeling of phase transitions of graphites to diamond-like phases. Physics of the Solid State, 2018, 60(7) 1294-1302.
3. В.А. Грешняков, Е.А. Беленков. Формирование нового алмазоподобного бислоя на основе графена 5-7. Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов, 2021, 13. 76-84 с.
4. G. Carotenuto, A. Longo, C. Camerlingo. Microstructures of carbon nanoscrolls characterized by polarized micro–Raman spectroscopy. New carbon materials, 2016, 31(6) 621-627.
5 Sha H., Zhang S., Faller R. Molecular investigation of gas adsorption, separation, and transport on carbon nanoscrolls: A combined grand canonical Monte Carlo and molecular dynamics study. Carbon, 2018, 132, 401-410.

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА НА МОРФОЛОГИЮ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ОКСИДА ГРАФЕНА, ПОЛУЧЕННОГО ИЗ ЛУКОВИЧНОГО УГЛЕРОДНОГО СЫРЬЯ

Я.Е. Курбатова[1, 2], **Д.В. Смовж**[1, 2]

[1]*Новосибирский государственный университет, Новосибирск*
[2]*Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск*
y.kurbatova@g.nsu.ru

Окисление углеродных материалов позволяет изменять химическое состояние их поверхности и вводить кислородсодержащие функциональные группы, сохраняя при этом часть исходного углеродного каркаса. Для графита степень окисления и характер функционализации во многом определяются условиями проведения реакции. При этом перенос стандартных протоколов окисления на другие формы углерода не всегда приводит к аналогичным результатам, поскольку исходная морфология материала непосредственно влияет на протекание процесса.

Оксид графена (ОГ) получают преимущественно окислением графита по методу Хаммерса и его модификациям. В структуре ОГ присутствуют гидроксильные, эпоксидные, карбоксильные и карбонильные группы, а их соотношение зависит от условий окисления и степени сохранности углеродного каркаса. Увеличение степени окисления сопровождается ростом количества дефектов и, соответственно, изменением свойств материала. Поэтому при синтезе ОГ необходимо учитывать не только содержание кислорода, но и характер распределения функциональных групп и сохранение sp^2-структуры.

Классический метод Хаммерса основан на окислении графита с помощью трех ключевых реагентов: нитрат натрия, перманганат калия и концентрированная серная кислота [1]. Одним из направлений его развития стало исключение нитрата натрия и использование альтернативных окислительных систем. В частности, применяются предварительное окисление персульфатом калия в присутствии фосфорного ангидрида [2] или использование борной кислоты вместо нитрата натрия [3]. Изменение состава окислительной системы сопровождается изменением глубины и скорости окисления и, как следствие, влияет на структуру и свойства получаемого материала.

В настоящей работе в качестве основного прекурсора использовали луковичное графеноподобное сырьё (ЛГС) – сферические углеродные частицы с концентрически расположенными графеноподобными оболочками, полученные пиролизом углеводородного прекурсора в реакторе циклического сжатия [4]. В отличие от природного чешуйчатого графита, ЛГС изначально представляет собой наноразмерные частицы с развитой многослойной структурой и не требует стадии эксфолиации. Поэтому при его окислении представляло интерес установить, возможно ли функционализировать внешние оболочки без существенного разрушения исходной сферической архитектуры.

Целью работы являлось исследование влияния условий окисления и типа углеродного прекурсора на морфологию, элементный состав, структуру и химическое состояние поверхности получаемых материалов.

Синтез проводили по четырём вариантам окислительной обработки. В качестве опорного режима использовали глубокое окисление природного графита по модифицированному варианту метода Хаммерса. Для ЛГС исследовали более мягкие режимы, отличавшиеся параметрами предварительной и основной стадий окисления, а также составом окислительной системы. Дополнительно оценивали вариант с сокращённой схемой обработки без части промежуточных операций. Такой подход позволил сопоставить влияние интенсивности и условий окисления на морфологию и химическое состояние получаемых материалов.

Полученные образцы исследовали методами сканирующей электронной микроскопии с энергодисперсионным элементным анализом (СЭМ-ЭДС), рентгенофазового анализа (РФА), спектроскопии комбинационного рассеяния света (КР), ИК-спектроскопии с Фурье-преобразованием (ФТИР) и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС). Сочетание объёмно- и поверхностно-чувствительных методов позволило сопоставить изменения элементного состава с состоянием поверхности и структурой частиц.

По данным СЭМ, продукт глубокого окисления графита (образец 1) имеет пластинчатую морфологию со складчатым рельефом. В отличие от него, образцы 2–4 (рис.1) сохраняют зернистую морфологию исходного ЛГС: во всех случаях наблюдаются округлые частицы размером порядка десятков нанометров. Таким образом, применённые режимы окисления ЛГС не приводят к разрушению его исходной сферической архитектуры.

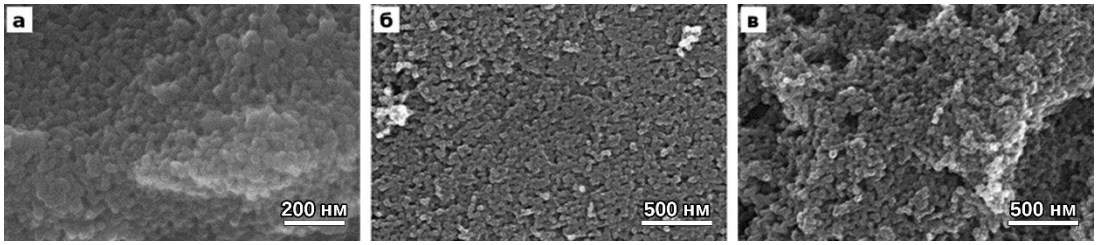


Рис. 1. СЭМ-изображения образцов 2–4, полученных из ЛГС при различных условиях окислительной обработки: (а) образец 2, (б) образец 3, (в) образец 4.

Элементный анализ показал существенное различие между продуктом глубокого окисления графита и материалами, полученными из ЛГС. Для образца 1 содержание кислорода было значительно выше, тогда как при использовании ЛГС оно оставалось на уровне нескольких атомных процентов. При этом значения, определённые методом ЭДС, не отражают непосредственно состояние внешней поверхности частиц, поскольку данный метод характеризует состав анализируемого объёма. Поэтому полученные результаты рассматривали совместно с данными РФЭС.

Результаты РФЭС показали выраженное присутствие кислородсодержащих компонентов на поверхности образцов ЛГС, причём их соотношение различалось в зависимости от условий обработки. Порядок образцов по степени поверхностного окисления не совпадал с результатами ЭДС. Для одного из исследованных вариантов дополнительно обнаружены серосодержащие компоненты. Различие между объёмно- и поверхностно-чувствительными методами указывает на неоднородное распределение кислородсодержащих групп в частицах ЛГС и подтверждает необходимость совместного анализа состава объёма и поверхности.

В спектрах КР всех исследованных образцов присутствуют полосы D и G. При окислении отношение I(D)/I(G) увеличивается, однако для рассматриваемых высокодефектных углеродных материалов этот параметр не следует использовать как единственный показатель степени функционализации. ИК-спектроскопия подтверждает появление кислородсодержащих функциональных групп: в спектрах окисленных образцов присутствуют полосы, соответствующие O–H, C=O и C–O–C/C–OH, отсутствующие в спектре исходного ЛГС.

По данным РФА, межплоскостное расстояние d(002) окисленных образцов ЛГС увеличивается лишь незначительно по сравнению с исходным графитоподобным материалом и остаётся существенно меньше значений, характерных для глубоко окисленного ОГ. Низкоугловой рефлекс (001), характерный для сильно окисленных графеновых материалов, не обнаружен. Это указывает на сохранение значительной части исходной турбостратной упаковки графеновых оболочек. Размеры областей когерентного рассеяния для образцов 3 и 4 находятся в пределах погрешности друг друга, тогда как различия между этими образцами проявляются преимущественно в химическом составе поверхности.

Совокупность полученных данных показывает, что изменение условий окислительной обработки позволяет изменять характер функционализации ЛГС без существенного разрушения его исходной сферической морфологии. При этом результаты различных методов анализа демонстрируют различия между составом объёма и химическим состоянием поверхности частиц, что указывает на преимущественно поверхностное протекание окисления при исследованных условиях.

Таким образом, тип углеродного прекурсора и условия его окислительной обработки оказывают существенное влияние на морфологию и характер функционализации получаемого материала. В отличие от глубоко окисленного природного графита, ЛГС в исследованном диапазоне условий сохраняет исходную многослойную сферическую архитектуру, при этом на поверхности формируются кислородсодержащие функциональные группы. Полученные результаты позволяют рассматривать ЛГС как перспективную основу для получения функционализированных углеродных материалов. Дальнейшая работа будет направлена на более детальное установление взаимосвязи между параметрами окисления, химическим состоянием поверхности и структурными характеристиками материала.

Литература

1. W.S. Hummers, R.E. Offeman. Preparation of Graphitic Oxide. J. Am. Chem. Soc., 1958, 80(6), 1339.
2. D.C. Marcano, et al. Improved Synthesis of Graphene Oxide. ACS Nano, 2010, 4(8), 4806–4814.
3. Q. Zhang, et al. Synthesis of graphene oxide using boric acid in Hummers method. Colloids Surf. A, 2022, 655, 129802.
4. Б. С. Ездин и др. Синтез углеродных наночастиц в реакторе сжатия в атмосфере буферных газов. 2022, 29–46

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МЕМБРАН ПОРИСТОГО АНОДНОГО ОКСИДА АЛЮМИНИЯ С ПЕРЕМЕННЫМ ДИАМЕТРОМ ПОР

А.Е. Курцевич, Е.А. Курцевич, Р.М. Гадиров

Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники
koall1996@yandex.ru

В современном мире не прекращается поиск новых материалов, удовлетворяющих растущим требованиям нанотехнологии, фотоники, биомедицины, энергетики. Новые материалы должны обладать заранее заданной наноструктурой, которая бы была легко воспроизводима [1]. Одним из материалов, который в последнее время привлекает все большее внимание, является пористый анодный оксид алюминия. В полностью контролируемом процессе электрохимического синтеза на аноде образуются мембраны оксида алюминия, поры в которых строго параллельны и имеют гексагональную форму. Важным преимуществом анодного оксида алюминия перед другими мембранными материалами, такими как кремний или керамика, является контроль за толщиной мембраны, размером и плотностью упаковки пор непосредственно в процессе синтеза [2].

Ранее мембраны из анодного оксида алюминия рассматривались исключительно как носители для других материалов или систем для пространственного ограниченного синтеза наночастиц (одномерных нанонитей). В последнее же время этот материал стал привлекать внимание и как оптический элемент. Диаметр поры имеет линейную зависимость от прошедшего тока, т.е. определяется приложенным напряжением. Благодаря точному контролю размера пор в процессе синтеза появляется возможность создания анизотропии показателя преломления вдоль поры. Таким образом мембраны из пористого оксида алюминия с переменным диаметром пор начинают проявлять свойства фотонных кристаллов [3]. Фотонные кристаллы (ФК) – это материалы с периодической модуляцией диэлектрической проницаемости, что приводит к запрету распространения света в определенном диапазоне частот [4, 5].

Основная характеристика фотонного кристалла – фотонная запрещенная зона (ФЗЗ), которая определяется эффективным показателем преломления материала, т.е. соотношением толщин слоев с различными показателями преломления, находящихся на оптическом пути [6]. В случае анодного оксида алюминия это будет чередование оксида алюминия на участках, где пора сужается, и воздуха (или иной среды), где пора, наоборот, расширяется. Для предсказания положения пика можно грубо оценить эффективный показатель преломления, используя соотношение:

$$n_{eff} = \sqrt{\sum_i f_i \cdot n_i^2}, \#(1)$$

где n_{eff} – эффективный показатель преломления, f_i – доля i-го компонента, n_i – его показатель преломления.

Тогда положение фотонной запрещенной зонной находится из условия волновода, полученного из закона Брэгга [7]:

$$\lambda = \frac{2 \cdot n_{eff} \Lambda}{m}, \#(2)$$

где λ – положение максимума отражения, Λ – период модуляции диаметра пор, m – порядок отражения (целое число). Далее рассматривается только первый порядок, поэтому m принимается равным единице.

Здесь реальная пора заменяется цилиндром, в котором чередуются слои среды и оксида алюминия равной толщины. При использовании симметричных форм модуляции, например, синусоидальной и треугольной, толщины слоев будут одинаковыми, и

эффективный показатель преломления для системы воздух-оксид алюминия можно найти как:

$$n_{eff} = \sqrt{\frac{n_{air}^2 + n_{Al_2O_3}^2}{2}} = \sqrt{\frac{1^2 + 1{,}43^2}{2}} = 1{,}23.$$

Однако такой подход довольно грубый, и гораздо более точные результаты можно получить путем численного моделирования распространения света в мембране. Прямое моделирование также позволяет учесть влияние формы поры на положение и форму фотонного пика.

В данной работе было рассмотрено влияние величины и формы модуляции диаметра пор на положение фотонного пика мембраны анодного пористого оксида алюминия в воздушной среде. Были рассмотрены периоды модуляции 200 и 250 нм, а также треугольная и синусоидальные формы модуляции пор (рис. 1).

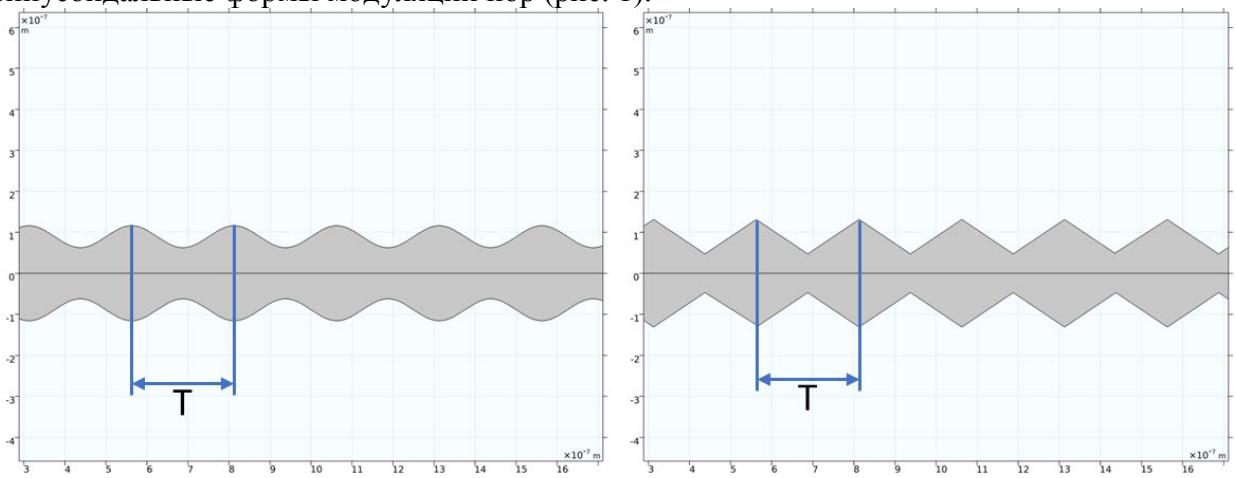


Рисунок 1. Вид поры в разрезе. Синусоидальная (слева) и треугольная (справа). Буквой T обозначен период модуляции (в примере T = 200 нм).

Результаты моделирования приведены в табл. 1 и на рис. 2.

Таблица 1. Положение ФЗЗ в мембранах.

Форма модуляции	Период модуляции, нм	ФЗЗ*, нм λ_1/λ_2
Синус	200	492/447
Треугольник	200	492/445
Синус	250	615/496
Треугольник	250	615/496

* λ_1 получена по формуле (2), λ_2 – путем численного моделирования

В случае синусоидальной и треугольной модуляций форма сформированной поры оказывает влияние на выраженность пика ФЗЗ: в случае треугольной формы модуляции пик образуется на том же месте, но более интенсивный и с меньшей полушириной.

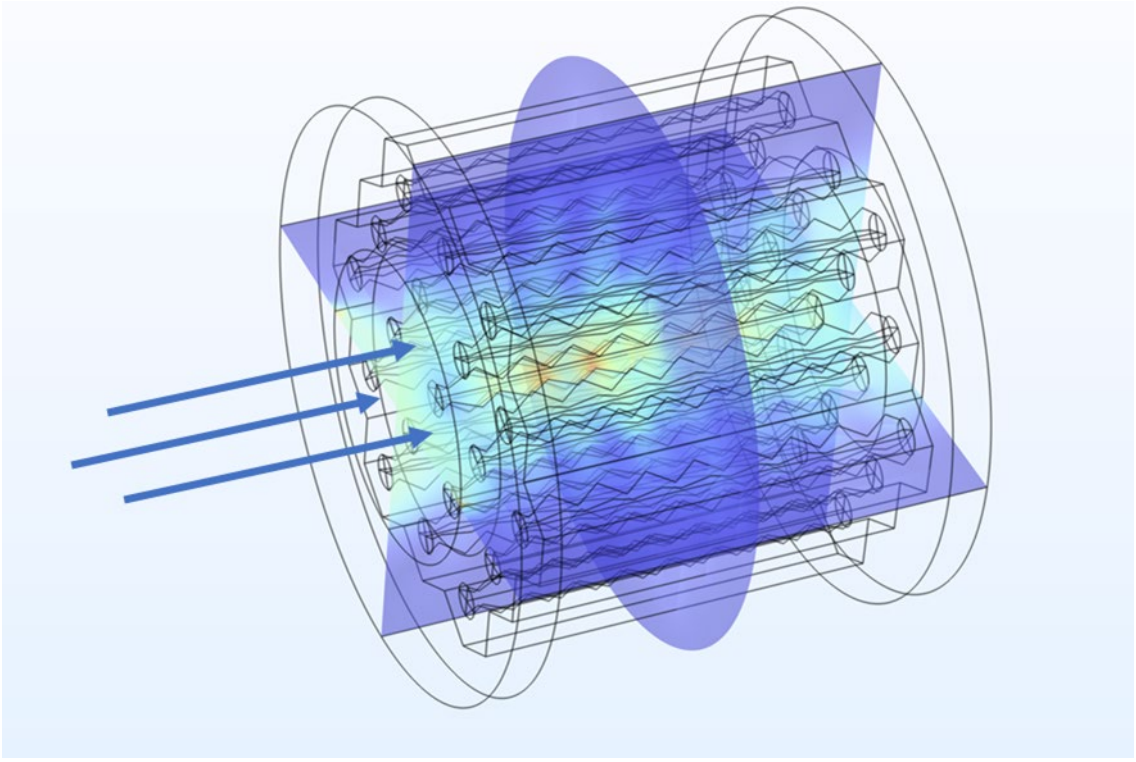


Рисунок 2. Распределение интенсивности напряженности электрического поля в мембране в области ФЗЗ. Стрелками показано направление падающего света.

Из полученных результатов можно увидеть, что формула (1) является слишком грубым приближением для определения положения ФЗЗ для данной системы, которое требует дальнейших уточнений для совпадения с результатами, полученными численным моделированием или экспериментально по спектрам отражения и пропускания.

Литература

1. M. A. Butt, S. N. Khonina, and N. L. Kazanskiy, Opt. Laser. Technol, 2021. 142, 107265.
2. C. S. Law, S. Y. Lim, A. D. Abell, N. H. Voelcker, and A. Santos, Nanomaterials, 2018. 8, 788.
3. М.В. Пятнов, М.М. Соколов, Р.Г. Бикбаев, П.С. Панкин, И.Р. Волкова, В.А. Гуняков, М.Н. Волочаев, И.И. Рыжков, С.Я. Ветров, И.В. Тимофеев, В.Ф. Шабанов, ЖТФ, 2024. 94, 278.
4. J. D. Joannopoulos, P. R. Villeneuve, S. Fan, Solid State Commun. 1997. 102, 165.
5. G. Shang, D. Bi, V. S. Gorelik, G. Fei, and L. Zhang, Mat. Tod. Comm, 2023. 34, 105052.
6. X. Lv, B. Zhong, Y. Huang, Z. Xing, H. Wang, W. Guo, X. Chang, Z. Zhang, Chin. J. Mech. Eng, 2023. 36, 39.
7. П. П. Свербиль, В. С. Горелик, G. T. Fei, D. Bi, G. T. Fei, S. H. Xu, and X. D. Gao, Оптика и спектроскопия, 2019. 127, 548.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках Госзадания FEWM-2024-0001.

ВЛИЯНИЕ ВСЕСТОРОННЕЙ ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ КОВКИ С ПОНИЖЕНИЕМ ТЕМПЕРАТУРЫ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА 1570С

О.Э. Латыпова, О.Ш. Ситдиков, Е.В. Автократова, М.В. Маркушев

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
oksana@imsp.ru

Совершенствование методов управления структурой труднодеформируемых алюминиевых сплавов - одна из ключевых задач материаловедения. Формирование ультрамелкозернистой (УМЗ) структуры методами интенсивной пластической деформации позволяет существенно повысить прочность при комнатной температуре и реализовать эффект сверхпластичности. Среди таких методов всесторонняя изотермическая ковка (ВИК) отличается технологической гибкостью, использованием стандартного оборудования и возможностью получения объемных заготовок с однородной УМЗ-структурой. Перспективным является вариант ВИК с понижением температуры, активирующий динамическую рекристаллизацию в широком интервале температур, что позволяет дополнительно измельчать зерна при более низких температурах.

Цель настоящей работы - установить закономерности формирования структуры и изменения механических свойств сплава 1570С при двухступенчатой ВИК (325 и 250°С), оценить термическую стабильность и сверхпластичность полученных состояний сплава.

Материал и методы исследования. Заготовки для ВИК Ø80 × 150 мм вырезали из промышленного слитка, гомогенизированного при 360°С в течение 6 часов (размер зерна 25 мкм). Первую ступень ковки при 325°С выполняли до суммарной степени деформации e = 12, вторую - продолжали при 250°С до e = 18. Выбор температуры первой ступени (325°С) был обусловлен оптимальным соотношением между интенсивностью динамической рекристаллизации и ростом зерен при высоких температурах, а второй (250°С) - ограничен температурой сольвуса β-фазы (Al_3Mg_2) во избежание ее выделения. Согласно классическим представлениям, снижение температуры деформации ниже 250–270°С может индуцировать выделение сеток магниевой фазы по границам зерен, что должно приводить к охрупчиванию и резкому ухудшению служебных характеристик. Деформация на каждой ступени включала несколько циклов последовательной осадки и протяжки при изменении оси нагружения и сохранении формы и размеров заготовки близкими к исходным. После каждого цикла заготовки охлаждали на воздухе.

Микроструктуру сплава анализировали в продольном сечении заготовок (параллельно последней оси сжатия) с использованием методов оптической микроскопии (микроскоп «Nikon L 150», травление в 40% NaOH и реактиве Келлера), сканирующей электронной микроскопии («TESCAN MIRA 3 LMH») с анализом дифракции обратно рассеянных электронов (EBSD) (HKL Channel 5), а также методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) («JEOL 2000EX»). Границы кристаллитов классифицировали как малоугловые ($2° \le \theta < 15°$) и большеугловые (БУГ, $\theta \ge 15°$). Средний размер (суб)зерен определяли методом эквивалентного диаметра.

Механические свойства при комнатной температуре оценивали по твердости по Виккерсу (HV, нагрузка 0.5 кгс, не менее 10 измерений) и параметрам статической прочности при одноосном растяжении (универсальная испытательная машина «Instron 1185», плоские образцы с рабочей частью 1.5×3×6 мм, не менее трех образцов для каждого состояния). Сверхпластические свойства исследовали в диапазоне температур 350–500°С и начальных скоростей деформации $1.4\times10^{-3} – 1.4\times10^{-1}$ $с^{-1}$.

Термическую стабильность УМЗ-структуры оценивали по изменениям структуры и твердости после часового отжига в интервале температур 400–450°С.

Результаты и обсуждение. Первая ступень ВИК трансформирует исходную крупнозернистую структуру (25 мкм) в УМЗ-структуру с размером (суб)зерен ~2.0 мкм и долей БУГ ~78% при средней разориентировке межкристаллитных границ ~31°. Выделения $Al_3(Sc,Zr)$ диаметром 5-15 нм, сформировавшиеся при гомогенизации, сохраняли размер и оставались когерентными в объеме зерен, тогда как вблизи границ незначительно укрупнялись. Прочностные характеристики остались на уровне исходного состояния: $\sigma_{0.2}$ = 235 МПа, $\sigma_в$ = 360 МПа, HV = 105, что объясняется конкуренцией упрочнения за счет измельчения зерна (эффект Холла-Петча) и разупрочнения вследствие частичной коагуляции дисперсоидов $Al_3(Sc,Zr)$. Пластичность сплава при комнатной температуре возросла до δ = 38% благодаря большой доле БУГ и активации множественных систем скольжения.

В результате второй ступени ВИК размер (суб)зерен уменьшился до ~1.5 мкм при сохранении высокой доли БУГ (~76%) и средней разориентировки границ (~30°). ПЭМ-анализ выявил повышенную плотность внутризеренных дислокаций и наличие вытянутых (суб)зерен вследствие частичного подавления динамического возврата при снижении температуры деформирования. Признаки выделения β-фазы Al_3Mg_2 не обнаружены; рост выделений $Al_3(Sc,Zr)$ вблизи границ замедлился из-за затруднения диффузии. Такие структурные изменения привели к росту прочности сплава ($\sigma_{0.2}$ = 265 МПа, $\sigma_в$ = 375 МПа, HV = 115) при сохранении пластичности на уровне δ = 33%. Упрочнение обусловлено двумя факторами: дальнейшим измельчением (суб)зерна (эффект Холла-Петча) и увеличением плотности дислокаций. При этом вклад дисперсионного твердения от частиц $Al_3(Sc,Zr)$ практически не изменился вследствие их замедленной коагуляции.

Термическая стабильность структуры. При часовом отжиге при 400°C оба кованых состояния сплава демонстрировали высокую стабильность структуры. При 425°C проявились различия: после ВИК при 325°C структура сохраняла УМЗ строение с отдельными признаками начальной рекристаллизации; после ВИК 250°C наблюдался аномальный рост отдельных зерен до 50 мкм. При 450°C рост зерен усиливался в обоих случаях, причем для двухступенчатого режима (с завершающей ковкой при 250°C) этот процесс протекал значительно интенсивнее. Такое поведение обусловлено тем, что снижение температуры ковки до 250°C сдвинуло начало аномального роста зерен с >450°C до 425°C вследствие повышенной накопленной энергии деформации (плотности дислокаций) и меньшего начального размера зерен (большей протяженности их границ). Также определенный вклад внесло изменение морфологии дисперсоидов $Al_3(Sc,Zr)$ вблизи границ с частичной потерей ими когерентности, снизившее их эффективность как барьеров для миграции межкристаллитных границ.

Сверхпластические свойства. После ВИК при 325°C сплав показал максимальное удлинение ~2800% при температуре 500°C и скорости 1.4×10^{-2} $с^{-1}$, а также при 450°C и 5.6×10^{-3} $с^{-1}$. После второго этапа ВИК максимальное удлинение снизилось до ~1700%. Однако выявлена высокоскоростная сверхпластичность при умеренных температурах (~400°C) с удлинениями ~1000% при скоростях до 1.4×10^{-1} $с^{-1}$, которая не фиксировалась в первом состоянии (максимум 750% при 5.6×10^{-3} $с^{-1}$ и снижение удлинений при более высоких скоростях деформации). Этот эффект обусловлен повышенной плотностью дислокаций, которая при умеренных температурах ускоряет диффузию и динамическую рекристаллизацию, облегчая переход к зернограничному проскальзыванию. При температурах выше 450°C та же структурная особенность - повышенная плотность дефектов - приводит к аномальному росту зерен и ограничению сверхпластичности, демонстрируя двойственную роль накопленных дефектов в сверхпластической деформации.

Сопоставление с ранее полученными результатами [1,2] показало, что двухступенчатая ВИК придает сплаву оптимальное структурное состояние для последующей холодной прокатки. При этом прочность листов достигает сравнительно высоких для неупрочняемых термообработкой алюминиевых сплавов значений ($\sigma_в$ до 540 МПа) в сочетании с высокой пластичностью (~20%). Однако такой эффект достигается за счет сильной деградации сверхпластических свойств: из-за аномального роста зерен при нагреве

под деформацию удлинения не превышают 250%. После первой ступени ВИК теплая прокатка при 325°С, напротив, позволяет получать аномально высокие удлинения до 3900% при скоростях деформации ~10^{-2} $с^{-1}$. Таким образом, двухступенчатую ВИК можно рекомендовать для получения высокопрочных полуфабрикатов, не требующих последующей высокотемпературной обработки, тогда как одноступенчатый режим предпочтителен, когда необходима высокотемпературная обработка, особенно в режиме сверхпластичности.

Заключение

1. Двухступенчатая ВИК (325 → 250°С) гомогенизированного слитка приводит к измельчению зерен в сплаве 1570С с 25 мкм до ~1.5 мкм (~76% БУГ) и повышает прочность ($\sigma_{0.2}$ +25 МПа, σв +15 МПа, HV +10) при пластичности ~30%, но снижает термическую стабильность сплава (начало аномального роста зерен смещается с >450°С до 425°С).

2. При Т≥450°С сверхпластические удлинения ограничены ~1700% (по сравнению с ~2800% после ковки при 325°С), в то время как при Т=350-400°С высокоскоростная сверхпластичность (~1000% при скорости >10^{-1} $с^{-1}$) превосходит состояние, полученное при ковке при 325°С (750% при 5.6×10^{-3} $с^{-1}$), что указывает на двойственную роль предварительно накопленной плотности дислокаций в сверхпластичности.

3. Ковка при 250°С является критическим режимом: измельчение зерен и упрочнение достигаются без значительного выделения β-фазы. Однако дальнейшее снижение температуры ВИК может привести к большей термической нестабильности структуры, а также к охрупчиванию сплава.

4. Прокатка, проводимая после двухступенчатой ВИК, позволяет повысить прочность листов до 540 МПа, но в значительной мере подавляет сверхпластичность. Этот способ рекомендуется только для изделий или полуфабрикатов, не требующих последующей высокотемпературной обработки или сверхпластической формовки.

Благодарности

Исследование выполнено в рамках государственного задания ИПСМ РАН. Работы проведены на базе Центра коллективного пользования ИПСМ РАН «Структурные и физико-механические исследования материалов».

Литература

1. O.Sh. Sitdikov, E.V. Avtokratova, O.E. Mukhametdinova, R.N. Garipova, R.R. Ilyasov, M.V. Markushev. Microstructure, mechanical properties and thermal stability of the ultrafine grained Al-Mg-Sc-Zr alloy processed by multy-directional isothermal forging. Mater. Phys. and mech., 2017, 33 137-151.
2. O.S. Sitdikov, E.V. Avtokratova, S.V. Krymskiy, R.R. Ilyasov, M.V. Markushev, Effect of Severe Forging and Rolling on the Microstructure and Mechanical Properties of Al–Mg–Sc–Zr Alloy. Inorg. Mater., 2021, 57(1) 101–111.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КИСЛОРОДНЫХ ВАКАНСИЙ В НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКИХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ НА ОСНОВЕ МАГНОНИОБАТА СВИНЦА

А.Р. Лебединская

Южный федеральный университет, Ростов на Дону
lebed1989@rambler.ru

В современном материаловедении перовскиты и материалы на их основе составляют фундамент класса нестехиометрических оксидов. Данные соединения подвергаются интенсивному фундаментальному и прикладному анализу ввиду высокой востребованности в промышленном секторе (в частности, при создании твердооксидных топливных элементов, высокочувствительных сенсоров и селективных мембран). Понимание микроскопической природы их функциональных характеристик открывает возможности для направленного синтеза материалов с контролируемым электромеханическим и проводящим откликом.

Ключевым фактором, определяющим макроскопический отклик и эксплуатационные характеристики таких материалов, является наличие упорядоченных или разупорядоченных дефектов кристаллической решетки. Изменение стехиометрии по кислороду приводит к существенной перестройке локальной симметрии, перераспределению электронной плотности и возникновению сильных электромеханических связей. Понимание фундаментальных закономерностей, связывающих дефектную структуру с процессами зарядопереноса, открывает прямые пути к направленному дизайну материалов с характеристиками, необходимыми для современной электроники.

. Ранее проведенными исследованиями установлено, что ключевым фактором, определяющим уникальные электромеханические свойства релаксорных сегнетоэлектриков, выступают коррелированные смещения ионов кислорода [1,2]. Локальное разупорядочение и коллективная динамика данных смещений формируют макроскопический диэлектрический и пьезоэлектрический отклик системы, что делает детальный анализ кислородной подрешетки критически важным для интерпретации физических свойств релаксоров.

Рентгеноструктурный анализ образцов выполнен при комнатной температуре на дифрактометре ДРОН-3М (CuK_α-излучение, Ni-фильтр, с фокусировкой по Бреггу–Брентано (θ−2θ). Регистрация дифракционных профилей проводилась в интервале углов $20^\circ \leq 2\theta \leq 60^\circ$ в режиме пошагового сканирования образец-детектор с шагом 0.02° и временем набора импульсов в каждой точке τ = 2с. Данный диапазон охватывает наиболее интенсивные рефлексы, а дальнейшее расширение угла 2θ нецелесообразно из-за перекрытия слабых пиков. Уточнение структуры было проведено в программе PowderCell 2.4.

В качестве базовой матрицы для моделирования кинетики и диффузии кислородных вакансий была выбрана нейтральная кубическая решетка перовскита ABO_3, содержащая предполагаемые кислородные вакансии, рассматриваемые нами как заряженные точечные дефекты. Исследуемые в данной работе твердые растворы на основе магнониобата свинца характеризуются неупорядоченным (случайным) заполнением B-подрешетки: ионы Mg^{2+} и Nb^{5+} статистически распределяются в центрах координационных октаэдров кислорода. При этом соотношение катионов в матрице строго детерминировано и полностью эквивалентно химической формуле структуры [3-5].

Согласно принципу суперпозиции электрических полей, на локальном (атомном) уровне замещение пятивалентного иона Nb^{5+} двухвалентным ионом Mg^{2+} эквивалентно возникновению пространственной области с избыточным отрицательным зарядом относительно невозмущенной бездефектной решетки. В терминах номенклатуры Крёгера - Винка данный катионный дефект замещения обладает тройным эффективным отрицательным зарядом и обозначается как Mg'''_{Nb} Для сохранения локальной электронейтральности структуры этот эффективный заряд компенсируется положительным

зарядом кислородной вакансии, которая в базовой оксидной матрице является дважды ионизированной, обозначается как $V_O^{\cdot\cdot}$и имеет эффективный заряд +2e.

Энергия кулоновского (электростатического) взаимодействия E_C между катионным дефектом замещения Mg_{Nb}''' и мобильной вакансией кислорода $V_O^{\cdot\cdot}$ на межатомных расстояниях описывается выражением:

$$E_C = \frac{q_1 . q_2}{4\pi\varepsilon_0 \cdot \varepsilon_r \cdot r} = \frac{(-3e)\cdot(+2e)}{4\pi\varepsilon_0 \cdot \varepsilon_r \cdot r} = \frac{-6e^2}{4\pi\varepsilon_0 \cdot \varepsilon_r \cdot r}$$

где e - элементарный электрический заряд, ε_0 - электрическая постоянная, ε_r - относительная диэлектрическая проницаемость релаксорной матрицы в локальной области дефекта, а r - расстояние между центрами тяжестей зарядов дефектов. Знак «минус» в уравнении указывает на дальнодействующий характер сил кулоновского притяжения, обуславливающих термодинамическую стабильность дипольных дефектных комплексов.

Миграция вакансий $V_O^{\cdot\cdot}$ в кислородной подрешетке носит дискретный прыжковый характер и осуществляется между соседними вершинами кислородного октаэдра.

Рентгеноструктурный анализ образцов нестехеометрических составов $PbMg_{1/2}Nb_{1/2}O_{2,5}$ и $PbMg_{1/3}Nb_{2/3}O_3$ выполнен при комнатной температуре на дифрактометре ДРОН-3М (CuK_α-излучение, Ni-фильтр, с фокусировкой по Бреггу–Брентано (θ−2θ). Регистрация дифракционных профилей проводилась в интервале углов 20◦ ≤ 2θ ≤60◦ в режиме пошагового сканирования образец-детектор с шагом 0.02◦ и временем набора импульсов в каждой точке τ = 2c. Данный диапазон охватывает наиболее интенсивные рефлексы, а дальнейшее расширение угла 2θ нецелесообразно из-за перекрытия слабых пиков. Уточнение структуры было проведено в программе PowderCell 2.4.

В результате анализа полученных экспериментальных данных и проведенного моделирования в рамках представленной модели можно сделать следующие заключения: электростатические поля, создаваемые разнозарядными катионами B-подрешетки, выступают главным фактором, ограничивающим подвижность и вызывающим локализацию носителей заряда. Микроскопическая кинетика ионного транспорта в разупорядоченных фазах $PbMg_{1/2}Nb_{1/2}O_{2,5}$ и $PbMg_{1/3}Nb_{2/3}O_3$ контролируется процессами индивидуального кулоновского захвата дважды ионизированных кислородных вакансий. Следствием этого взаимодействия становится формирование асимметричных коррелированных смещений кислородной подрешетки из регулярных узлов перовскита, что приводит к геометрической дисторсии октаэдров и генерации локальных дипольных моментов. Подобные дефекты не только динамически изменяют профиль и высоту потенциальных барьеров для прыжков вакансий, но и возможно вносят определяющий вклад в макроскопический релаксорный отклик диэлектрика при наложении внешних полей.

Литература

1. M.D. Glinchuk, L.P. Yurchenko, E.A. Eliseev. New trends in the nanophysics of ferroics, relaxors and multiferroics. Condensed Matter Physics, 2022, 25(4) 42201.
2. G.A. Samara. The relaxational properties of compositionally disordered ABO3 perovskites. J. Phys. Condens. Matter, 2003, 15 R367.
3. A.R Lebedinskaya, A.G. Rudskaya. Influence of composition nonstoichiometry and ordering effects on the properties of ferroelectric ceramics based on lead magnoniobate. IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering, 2020, 100 012061.
4. M.D. Glinchuk, E.A. Eliseev, V.A. Stephanovich, et al. Description of ferroelectric phase transitions in solid solutions of relaxors in the framework of the random-field theory. Phys. Solid State, 2001, 43 1299–1306.
5. A.R. Lebedinskaya. Structural analysis of the Pb-based relaxor of ferroelectrics using X-ray study in the absence of an electric field. In book “Physics and Mechanics of New Materials and Their Applications (PHENMA 2018)”. Abstracts & Schedule. Edited by Yun-Hae Kim, I.A. Parinov, S.-H. Chang. 222.
6. M.D. Glinchuk, E.A. Eliseev, V.A. Stephanovich, et al. Ferroelectricity induced by oxygen vacancies in relaxors with perovskite structure. Physical Review B, 2018, 98 094102.

К ВОПРОСУ О СТАНДАРТАХ КОРРОЗИОННО-УСТАЛОСТНЫХ ИСПЫТАНИЙ ДЛЯ БИОРЕЗОРБИРУЕМЫХ МАТЕРИАЛОВ

Линдеров М.Л., Мерсон Д.Л.

Тольяттинский государственный университет, г. Тольятти
dartvi@gmail.com

Производство современной продукции невозможно без наличия высокотехнологичной испытательной базы. Поэтому перечень испытаний, заложенный в технической документации на изделие, косвенно отражает «уровень»[1], на котором данная продукция находится. Чрезвычайно важно быть в курсе имеющихся мировых стандартов по интересующей тематике, так как появление новых может свидетельствовать о переходе отдельных производств на другой технологический уклад. Также для открытия новых направлений производства важно понимать текущий технологический уровень у конкурентов, чтобы оценить насколько вообще предлагаемые разработки могут быть рентабельны.

Для магниевых сплавов медицинского назначения, предполагаемых к использованию для изготовления временных металлических конструкций, одними из важнейших характеристик являются коррозионно-усталостная долговечность. В представленной работе анализируется мировой опыт, имеющийся в принятых стандартах по усталостным испытаниям, для оценки современного уровня их развития и применимости для биорезорбируемых материалов.

В работе будут проанализированы следующие стандарты и сделаны выводы о перспективных путях дальнейшего развития коррозионно-усталостных испытаний для временных металлических конструкций:

1. Классический отечественные стандарты на усталость:
    a. ГОСТ 25.502-79 Методы механических испытаний металлов. Методы испытаний на усталость.
    b. ГОСТ 25.505-85 Методы механических испытаний металлов. Метод испытаний на малоцикловую усталость при термомеханическом нагружении.
2. Зарубежные стандарты на усталость, используемые для материалов медицинского назначения:
    a. ASTM F1801-20 Corrosion Fatigue Testing of Metallic Implant Materials.
    b. ASTM F3744-26 Corrosion Fatigue Evaluation of Absorbable Metals.
3. Отдельные стандарты на имплантаты:
    a. ГОСТ Р ИСО 16428-2014 Имплантаты для хирургии. Испытательные растворы и условия среды для статических и динамических испытаний на коррозионную стойкость имплантируемых материалов и медицинских изделий.

Работа выполнена в рамках государственного задания FEMR-2024-0002

[1] Термин взят в кавычки, так как является авторским. Частично он связан с циклами Кондратьева, смену вол которых объясняют появлением нового технологического уклада, возникающего в промышленности. В данном случае рассматривается своеобразный авторский «уровень», имеющийся при производстве конкретных изделий. Например, в эпоху пятого технологического уклада по Кондратьеву могут быть производства, соответствующие другим укладам, при этом по «уровню» в технической документации они также будут отличаться.

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕМЕНТНОГО СОСТАВА И ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКИХ ОБРАБОТОК НА ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В МАЛОАКТИВИРУЕМОЙ АУСТЕНИТНОЙ СТАЛИ В УСЛОВИЯХ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СТАРЕНИЯ

И.Ю. Литовченко[1, 2], Н.А. Полехина[1], С.А. Аккузин[1], В.В. Осипова[1, 2], А.В. Ким [1, 2], И.С. Тимошов[1, 3], В.М. Чернов [4]

[1]Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск
[2]Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск
[3] Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск
[4]АО «ВНИИНМ им. академика А.А. Бочвара», Москва
litovchenko@ispms.ru

Малоактивируемые аустенитные стали обеспечивают быстрый спад наведенной активности по сравнению с традиционно используемыми в энергетике хромоникелевыми аустенитными сталями. Однако отсутствие в составе таких сталей никеля, определяет проблемы в обеспечении стабильности аустенита в условиях пластической деформации, высоких температур и облучения. В работах [1, 2] были разработаны высокомарганцевые малоактивируемые аустенитные стали, обладающие повышенной стабильностью аустенита по отношению к превращениям в α'-мартенсит. В таких сталях значения никелевого эквивалента по диаграмме Шеффлера (> 20), сравнимы с соответствующими значениями для стабильных хромоникелевых аустенитных сталей. Однако в условиях длительного высокотемпературного старения при 700 °С в таких сталях обнаружена выраженная тенденция к выделению карбидов $M_{23}C_6$ ($Cr_{23}C_6$) и σ-фазы (при старении в холоднодеформированном состоянии), отрицательно влияющих на удлинение до разрушения [1, 2].

Для ограничения тенденции к выделению нежелательных фаз в условиях длительного высокотемпературного старения, в настоящей работе предложена модификация элементного состава малоактивируемых аустенитных сталей, состоящая в снижении содержания Cr и C, и повышении содержания Si. Получена сталь 9Cr27MnWTiTa, исследованы особенности ее микроструктуры после закалки, холодной деформации (ХД) и высокотемпературной термомеханической обработки (ВТМО), а также после старения при 700 °С в указанных структурных состояниях. Показано, что изменение элементного состава стали не оказало существенного влияния на характерные особенности микроструктуры стали как до, так и после старения. Основное отличие в поведении стали 9Cr27MnWTiTa в условиях старения состоит в уменьшении размеров и линейной плотности карбидов $M_{23}C_6$ на границах зерен, микродвойников и малоугловых границах (в случае старения после ВТМО).

Исследования механических свойств стали 9Cr27MnWTiTa в условиях испытаний на растяжение в указанных структурных состояниях до и после старения показали, что механические свойства стали сопоставимы с соответствующими значениями для сталей с более высоким содержанием хрома и углерода. При этом после старения пластические свойства сохраняются на хорошем уровне и отсутствует значительный разброс в значениях механических свойств.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-19-00802-П, https://rscf.ru/project/22-19-00802/

Литература

1 I. Litovchenko, S. Akkuzin, N. Polekhina, V. Osipova, A. Kim, K. Spiridonova, V. Chernov. Effect of aging at 700 °C on the microstructure, phase transformations, and mechanical properties of low-activation austenitic steel. Materialia, 2025, 39 102335.
2. I. Litovchenko, S. Akkuzin, N. Polekhina, V. Osipova, A. Kim, K. Spiridonova, V. Chernov. The Effect of Structural States on the Microstructure and Mechanical Properties of Low-Activation Austenitic Steel after Long-term Thermal Exposure at 700 °C. J. Manuf. Mater. Process**.,** 2026, *10 (*4) 126.

ТВЕРДОФАЗНАЯ СВАРКА ТИТАНОВОГО СПЛАВА ВТ14 С МАГНИЕВЫМ СПЛАВОМ AZ31

Р.Я. Лутфуллин[1], О.Б. Кулясова[2], М.Х. Мухаметрахимов[1], О.А. Руденко[1], А.А. Саркеева[1]

[1] Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа, Россия
[2]Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия
lutfullin.ramil@imsp.ru

В настоящее время отмечается рост спроса на легкие и жесткие конструкции с экономичными и экологически выгодными технологическими решениями, в частности, при изготовлении, панелей самолетов и обшивки транспортных средств [1-3]. Ключевую роль в производстве таких сложных и облегченных деталей играют прогрессивные технологии сварки [4].

Магниевые сплавы являются перспективными для применения в аэрокосмической промышленности, автомобилестроении, биомедицине и энергетике благодаря своим уникальным свойствам, таким как высокая удельная прочность, низкая плотность, повышенные демпфирующие свойства, биосовместимость, возможность вторичной переработки [5]. Однако магниевые сплавы обладают низкой коррозионной стойкостью, что ограничивает их широкое применение. В отличие от них, титановые сплавы наряду с высокой прочностью обладают способностью надежно работать в течение длительного времени в условиях повышенных температур и агрессивных сред.

Потенциал использования данных материалов может существенно возрасти при переходе к композиционным материалам, объединяющим взаимодополняющие свойства их составляющих. Однако, создание титан-магниевых композитов сопряжено с серьёзной научно-технической проблемой, обусловленной значительным различием физико-химических характеристик компонентов: огромная разница температур плавления, практическая нерастворимость [2].

Исследований по твердофазной сварке титановых сплавов с магниевыми чрезвычайно мало. Отдельные работы посвящены диффузионной сварке в жидкой фазе с применением промежуточных слоев или покрытий [6,7]. Однако такой технологический метод приводит к образованию хрупких интерметаллидных слоев в сварных соединениях, резко ухудшающих механические свойства. Достижение качественного твердофазного соединения (ТФС) титановых и магниевых сплавов актуально для создания титан-магниевых слоистых материалов с высокими конструкционными и демпфирующими свойствами, остро востребованных прежде всего в авиакосмической промышленности.

В данной работе проведены эксперименты по твердофазной сварке в вакууме магниевого сплава AZ31 с титановым сплавом ВТ14 в интервале температур 380 – 530 °С. Показана принципиальная возможность успешной твердофазной сварки исследуемых сплавов: достигнуто беспористое соединение, что подтверждено металлографическими исследованиями с помощью растрового электронного микроскопа. Исследовано изменение микротвердости в зоне ТФС и определено распределение легирующих элементов (рис. 1).

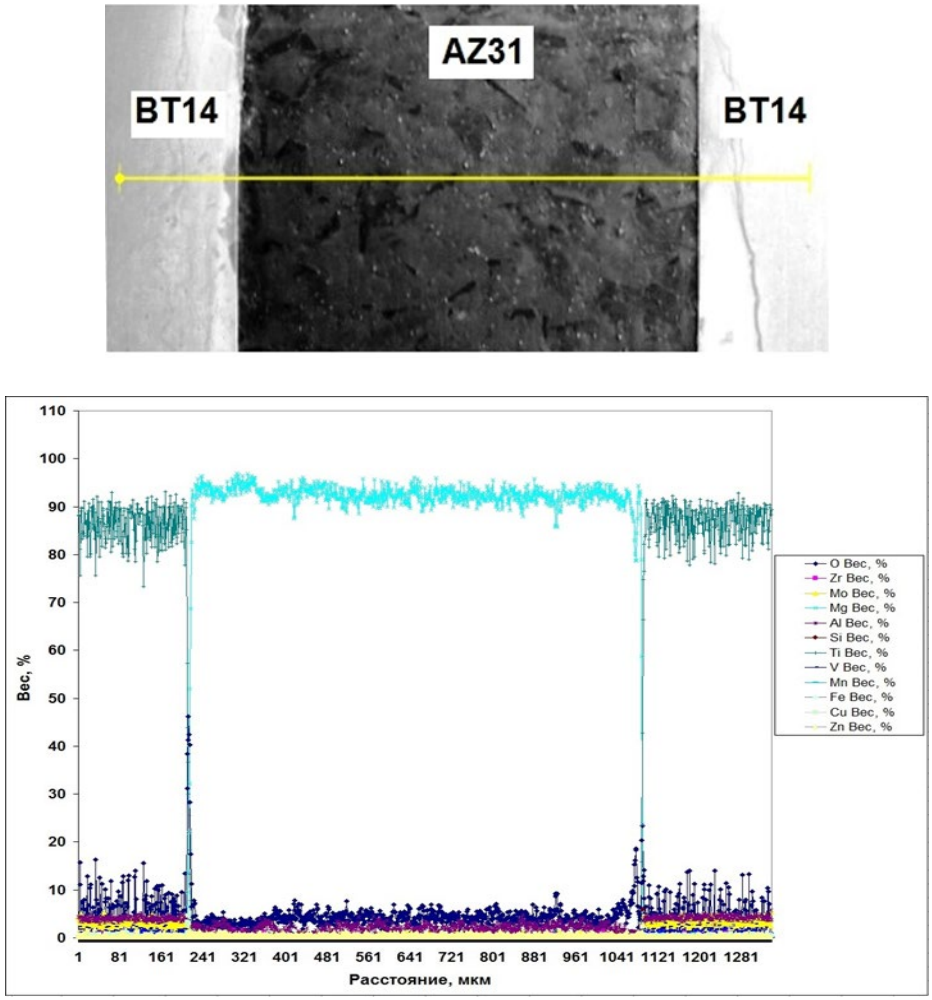


Рис. 1. Распределение легирующих элементов в зоне ТФС после сварки давлением при температуре 380 °С

Литература

1. P.M.S.T. De Castro. Advanced design for lightweight structures: review and prospects. Prog. Aerosp. Sci., 2014, 69 29-39.
2. Fanjin Yao, Guoqiang You, Lei Wang, Qi Li, Sheng Zeng, Yue Ming. Design, fabrication, microstructure, and mechanical properties of interlayer-free vacuum diffusion bonding Mg/Ti composites. Vacuum, 2022, 199, 110947.
3. Tianle Li, Yiwen Lei, Lezong Chen, Heng Ye, Xiaochun Liu, Xifeng Li. Advances in mechanism and application of diffusion bonding of titanium alloys. Journal of Materials Processing Tech., 2025, 337, 118736.
4. S. Liu, Z.Q. Wu, W.H. Zhou, H.G. Zhou, K.K. Zhang, D.Q. Yin, Y.P. Lei, Y.F. Qiu. A review of welding simulation methods for large components. Prog. Nat. Sci. Mater. Int., 2023, 33 551-568.
5. J.F. Song, J. She, D.L. Chen, F.S. Pan. Latest research advances on magnesium and magnesium alloys worldwide. J. Magnes. Alloy, 2020, 8 1-41.
6. A. AlHazaa, I. Alhoweml, M.A. Shar, M. Hezam, H.S. Abdo, H. AlBrithen. Transient liquid phase bonding of Ti-6Al-4V and Mg-AZ31 alloys using Zn coatings. Materials, 2019, 12 1-14.
7. A.M. Atieh, T.I. Khan. 2013. Effect of process parameters on semi-solid TLP bonding of Ti-6Al-4V to Mg-AZ31. J. Mater. Sci., 2013, 48 6737-6745.

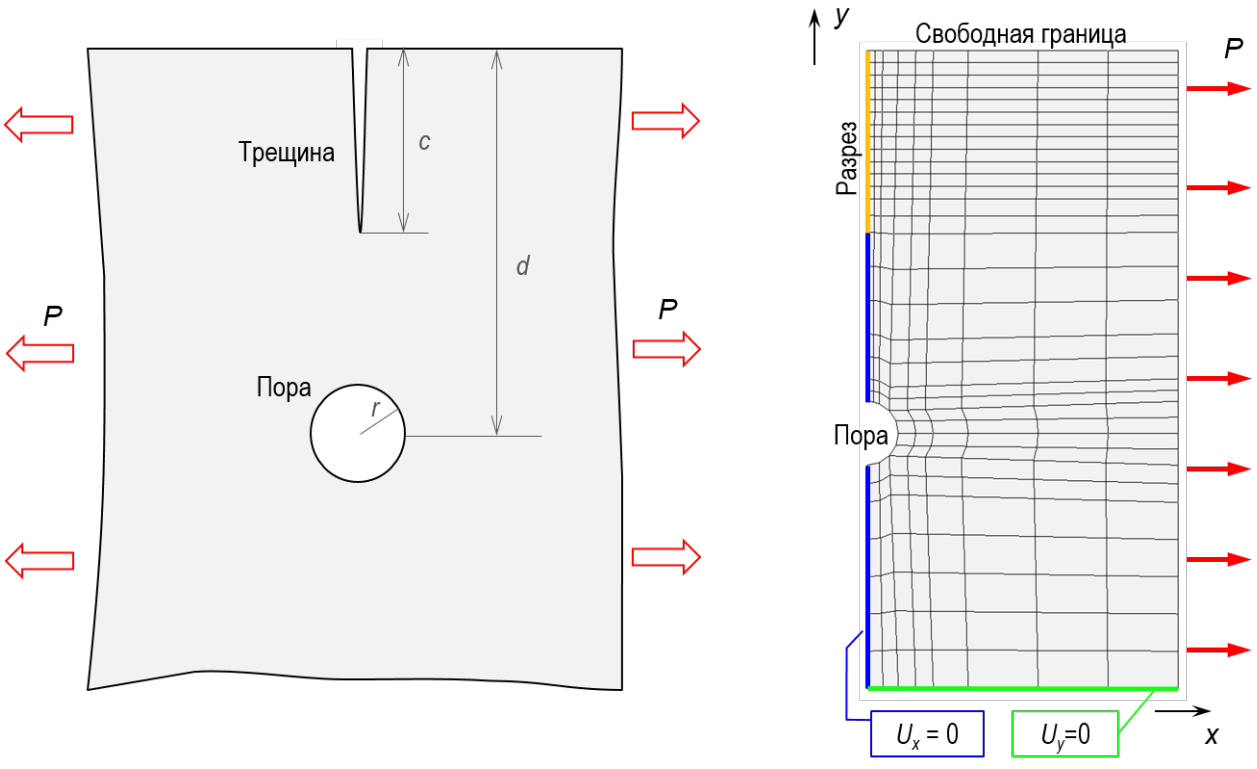
КОНЕЧНО-ЭЛЕМЕНТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТАЦИОНАРНОГО РОСТА ПОВЕРХНОСТНОЙ ТРЕЩИНЫ

Л.Л. Лушникова[1], С.А. Красницкий[2], М.Ю. Гуткин[1, 2]

[1]*Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург*
[2]*Университет ИТМО, Санкт-Петербург*
lushnikovalyub@yandex.ru, krasnitsky@inbox.ru

Разработка керамических материалов, обладающих высоким сопротивлением к хрупкому разрушению, представляет большой интерес в современном материаловедении [1]. Трещиностойкость таких керамик во многом определяется присутствием внутренних дефектов, образующихся при спекании керамических порошков с различными соединениями, например, с частицами металлов или графена [2]. В частности, эффект концентрации напряжений, связанный с дефектами, может оказывать значительное влияние на зарождение и последующий рост трещин. В наших предыдущих работах рост трещины в окрестности включений [3] и пор [4] был рассмотрен в рамках конечно-элементного (КЭ) моделирования. В данной работе рассматривается изменение энергии тела при росте поверхностной трещины с учетом влияния поры, расположенной в приповерхностном слое.

На рис. 1а представлена расчетная модель полубесконечного тела с плоской свободной поверхностью и порой, расположенной на расстоянии d от поверхности. Тело нагружено одноосным растягивающим напряжением p. В таких условиях ожидается рост трещины от свободной поверхности к поре. Более того, концентрация напряжений в окрестности поры будет способствовать продвижению трещины. При этом рост трещины будет сопровождаться уменьшением потенциальной энергии системы.



а б

Рис. 1. (а) Поверхностная трещина в полубесконечном теле с порой; (б) КЭ модель тела с плоским разрезом (КЭ сетка показана условно)

Для моделирования процесса разрушения разработана параметрическая КЭ модель, показанная на рис. 1б. Модель представляет собой прямоугольную область с учетом

симметрии задачи. Для дискретизации модели использованы плоские четырехузловые КЭ с линейной интерполяцией, реализующие условия плоской деформации. Размер области выбирается достаточно большим – так, чтобы влиянием границ на напряженное состояние в окрестностях трещины и поры можно было пренебречь. Верхний край области свободен от действия сил, правый нагружен растягивающим напряжением p. Трещина рассматривается как плоский разрез, берега которого также свободны от действия сил (трещина отрыва). Материал – упруго-изотропный с модулем сдвига G и коэффициентом Пуассона ν.

В ходе численного решения были определены деформации и напряжения, а также связанная с ними упругая энергия тела с трещиной, которая рассчитывалась по формуле:

$$E_{st} = \sum_{k=1,\ldots,N} S(k)\,\sigma_{ij}(k)\,\varepsilon_{ij}(k) \qquad (1)$$

где N – число элементов в модели, $S(k)$ – площадь k-го элемента, $\sigma_{ij}(k)$ и $\varepsilon_{ij}(k)$ – компоненты тензоров напряжения и деформации k-го элемента.

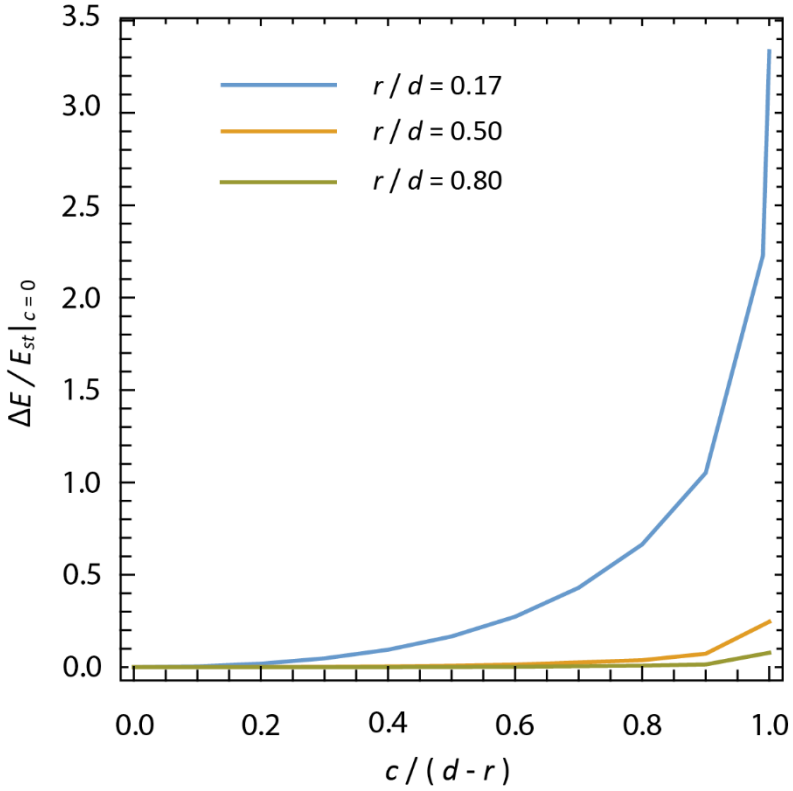


Рис. 2. Зависимость изменения энергии ΔE от безразмерной длины трещины $c / (d - r)$ для p = const и r / d = 0.17, 0.5, 0.8. Изменение энергии нормировано на энергию тела без трещины $E_{st}|_{c=0}$.

На рис. 2 представлена зависимость изменения упругой энергии полубесконечного тела $\Delta E = E_{st}|_{c=0} - E_{st}|_c$ от длины трещины c, построенная при постоянном значении p для разных значений положения поры относительно свободной границы r / d = 0.17, 0.5 и 0.8. Видно, что в случае мягкого нагружения (p = const) выигрыш в упругой энергии возрастает с ростом длины трещины. Показано, что упругая энергия сильно зависит от положения поры. Так, например, при фиксированной безразмерной длине трещины ($c / (d - r) = 0.8$) для поры, сравнительно удаленной от поверхности тела ($r / d = 0.17$), энергия тела с трещиной составляет $\sim 0.8 E_{st}|_{c=0}$, а для поры, расположенной сравнительно близко к границе ($r / d = 0.5$), она равна $\sim 0.04 E_{st}|_{c=0}$. Таким образом, чем ближе пора расположена к свободной поверхности, тем меньше упругая энергия, запасаемая в теле с поверхностной трещиной отрыва.

Данная работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 23-19-00236-П).

Литература

1. O. Gavalda-Diaz, E. Saiz, J. Chevalier, F. Bouville. Toughening of ceramics and ceramic composites through microstructure engineering: A review. Int. Mater. Rev., 2025, 70(1) 3-30.
2. M. Mukhtar, B. Shen, H. Yang, A.G. Sheinerman, Y. Wang, H. Gleiter, Y. Dong, J. Li. Toughening of alumina ceramics by nanograin refinement. Ceram. Int., 2025, 51(17) 24348-24353.
3. E.V. Ignateva, S.A. Krasnitckii, A.G. Sheinerman, M.Y. Gutkin. The finite element analysis of crack tolerance in composite ceramics. Mater. Phys. Mech., 2023, 51(2) 21-26.
4. Yu.V. Ermolaeva, S.A. Krasnitckii, M.Yu. Gutkin. Temperature dependence of linear fracture mechanics parameters in ceramics: a finite element study. Mater. Phys. Mech., 2025, 53(6) 1-11.

СУБСТРУКТУРНОЕ УПРОЧНЕНИЕ ПРИ ТРЕНИИ В ГЦК МОНОКРИСТАЛЛАХ

Д.В. Лычагин[1], Л.Л. Лычагина[2]

[1]Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск
[2]Томский государственный архитектурно-строительный университет, Томск
lychagin@mail.tsu.ru

При различных способах воздействия формируются дислокационные и ноно-, субзеренные субструктуры, которые изменяются с расстоянием закономерным образом. Такая субструктура получила название градиентной субструктуры. Вопросам формирования таких субструктур посвящены сборники трудов и монографии [1, 2]. Исследования различных материалов при трении показало, что в узком приповерхностном слое (≈10 мкм) формируются градиентные субструктуры. Они характеризуются резким переходом от нанозеренной субструктуры, наблюдаемой при интенсивной пластической деформации, к дислокационным субструктурам умеренных степеней деформации, наблюдаемых в материалах, деформируемых с постоянной скоростью. В связи с подобием процессов формирования дефектных субструктур при трении и эволюции субструктур при других способах деформации представляется возможным использовать общие подходы к оценке субструктурного упрочнения для градиентных участков материала при трении. Целью данной работы является выделение основных вкладов в субструктурное упрочнение при трении монокристаллов однофазных металлов и сплавов с ГЦК решеткой.

Напряжение скольжения металлов и однофазных сплавов определяется прочностью связей в кристалле. Это напряжение определяет напряжение, необходимое для генерации и скольжения дислокации при деформации. Важна кристаллографическая зависимость прочности связей, обуславливающая плоскости и направления сдвига, а также кристаллографическую зависимость предела текучести. Наличие атомов разного сорта обуславливает дополнительное упрочнение, определяемое как твердорастворное.

Наряду с твердорастворным упрочнением сопротивление движению дислокаций оказывают дефекты разного уровня: точечных, линейных (дислокации) и поверхностных (границы или субграницы). Плотность этих дефектов определяет длину пробега дислокации и возможность изменения формы кристалла под нагрузкой. Поэтому в теориях субструктурного упрочнения присутствуют вклады от этих структурных групп. Как правило, основными являются зависимости от плотности дефектов. Упрочнение определяется скоростью накопления дислокаций и субграниц при деформации. Отметим, что в последнем случае, такими границами могут быть и границы двойников. Таким образом, субструктурное упрочнение обусловлено двумя группами дефектов: дислокационным ансамблем и ансамблем субграниц.

Дислокационный ансамбль может быть качественно разделен на типы дислокационных субструктур: хаотически распределенные дислокации; дислокационные скопления; сетчатая, клубковая, ячеистая, сетчато-ячеистая или неярко выраженная ячеистая дислокационные субструктуры [3]. Субструктуры от сетчатой до ячеистой фактически представляют ряд с разной степенью неравномерности распределения дислокаций [4]. Очевидно, следствием этого являются теории и экспериментальные оценки вкладов в упрочнение, в которых фигурирует или скалярная плотность дислокаций или размер дислокационных ячеек [5]. При контактном сопротивлении движению дислокаций, сопротивление оказывают дислокации другой системы скольжения – сопротивление от «леса» дислокаций. Такой субструктуре соответствует только сетчатая дислокационная субструктура, которая формируется при умеренных деформациях и энергиях дефекта упаковки. Другой крайний случай, это ячеистая дислокационная субструктура, которая формируется в металлических материалах с высокой энергией дефекта упаковки. Для этой субструктуры упрочнение рассматривают по типу барьерного торможения дислокаций.

К деформационным субструктурам с субграницами различного типа можно отнести двойниковую субструктуру, микрополосовую субструктуру, фрагментированную субструктуру различной степени совершенства, суб-, субмикро- и нанозеренную субструктуру. В зависимости от энергии дефекта упаковки, гомологической температуры деформации, ее скорости и локальных напряжений в металлических ГЦК материалах может реализоваться тот или другой тип субструктуры и своя последовательность эволюции субструктур. Для материалов деформированных в области умеренных температур и скоростей деформации авторы работы [3] выделяют два варианта эволюции, которые при высоких деформациях стремятся к нанозеренной субструктуре. Отметим, что детальное описание субструктур и определение их объемной доли позволило объяснить стадийность кривых деформации [6]. В зависимости от реализующихся локальных механизмов деформации могут наблюдаться комбинации субструктур. Наряду с образованием субграниц и двойников (механизм переориентации) наблюдаются дислокации, свидетельствующие о деформации скольжением. Могут наблюдаться системы двойников разного масштабного уровня (двойникование внутри более крупных двойников). В стали Гадфильда внутри нанозерен наблюдаются нанодвойники, что обуславливает высокое упрочнение этой стали.

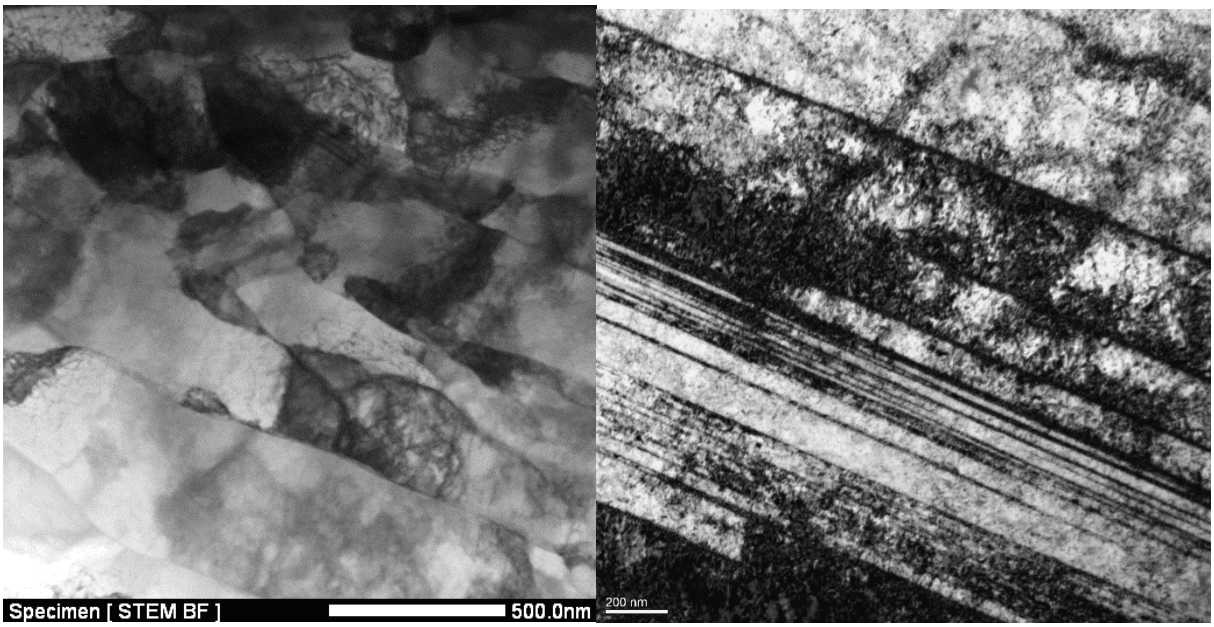
В настоящей работе рассматривали изменение субструктур, формирующихся при приближении к поверхности трения, в монокристаллических материалах, различающиеся энергией дефекта упаковки и гомологической температурой деформации. Использование монокристаллов позволяет исключить влияние границ зерен и различие в ориентации отдельных зерен. Сравнивали структурные изменения в меди и стали Гадфильда при сухом трении скольжения. В таблице представлена эволюция субструктур в этих материалах при приближении к поверхности трения и тип вклада в упрочнение от этих субструктур. При приближении к поверхности трения деформация и напряжение увеличиваются, что делает удобным сопоставить структурные изменения при трении с эволюцией субструктур материалов, деформируемых с постоянной скоростью. В связи с этим, выделена отдельная колонка, показывающая, какой стадии кривых деформационного упрочнения может соответствовать образование этих субструктур.

Таблица. Эволюция субструктур при трении

Медь			Сталь Гадфильда		
Ячеистая без разориентировок	Б	II	Сетчатая и сетчато-ячеистая	К+Б	II
Ячеистая с разориентировками	Б	II	Ячеистая	Б	II
Микрополосовая	Г	III	Микрополосы и двойники*	Г+ Дв	III
Фрагментированная	Г	IV	Фрагментированная с *	Г+ Дв	IV
Микрозеренная	Г	IV	Фрагмент. с субмикрополосами	Г	IV
Суб- и субмикрозеренная	Г	V	Фрагмент. с нанодвойниками	Г	V
Нанозеренная	Г	VI	Нанозеренная с нанодвойниками	Г	VI

Основные вклады в субструктурное упрочнение дают торможение дислокаций на дислокациях (К) (контактное торможение), дислокационных сгущениях (Б) и границах различного типа, включая субграницы (Г), границы двойников (Дв) и ноно- и субзерен (Г). Деформация определяется пробегом дислокаций между стенками ячеек или субграницами. Величина барьерного и субграничного вклада обратно пропорциональна размеру дислокационных ячеек или размеру структурных элементов с границами различного типа. Например, оценки показывают, в при уменьшении размера дислокационных ячеек от 1 мкм до 0,3 мкм (аналогичное изменение размера ячеек наблюдается в пределах стадий II и III кривых деформационного упрочнения) барьерный вклад увеличивается в 3 раза. Аналогичные оценки по подобному соотношению для субструктурного вклада границ различного типа при их изменении от 0,3 мкм до 0, 04 мкм соответствует увеличению напряжения в 4 раза до 2000 МПа для стали Гадфильда.

На рисунках представлены снимки, показывающие, что для двойниковой и микрополосовой субструктур возможна комбинация барьерного и субграничного упрочнения. Это обусловлено тем, что между границами наблюдаются сгущения дислокаций.



а б

Рис. Неоднородное распределение дислокаций между субграницами в меди (а) и двойниками в стали Гадфильда (б)

Кроме рассмотренных вкладов в субструктурное упрочнение авторы работы [3] предлагают рассматривать вклад в упрочнение от дальнодействующих напряжений. О наличии локальных напряжений в кристалле свидетельствуют изгибные экстинкционные контуры, наблюдаемые в просвечивающем электронном микроскопе. Их определению в различных субструктурах посвящена работа [7]. Возможности учета локальных напряжений расширилась в связи с развитием метода дифракции отраженных электронов.

Таким образом, идентичность субструктур, формирующихся при деформации с постоянной скоростью и трении, позволяют использовать развитый аппарат субструктурного упрочнения для оценки упрочнения в градиентных структурах, формирующихся в подповерхностных трибослоях.

Литература

1. В.А. Бердышев, Э.В. Козлов, В.Е. Громов Градиентные структурно-фазовые состояния в рельсовой стали. М.: Недра, 2000. 175 с.
2 В.В. Коваленко и др. Физическая природа формирования и эволюции градиентных структурно-фазовых состояний в сталях и сплавах. Новокузнецк: СибГИУ, 2009. 557 с.
3 Э.В. Козлов, Н.А. Конева Природа упрочнения металлических материалов. Изв. ВУЗов Физика, 2002, 3, 52-72.
4 N.A. Koneva et al. Formation of dislocation cell substructure in face-centred cubic metallic solid solutions. Mater. Sci. Eng. A, 2008, 483–484, 179–183.
5 E.V. Kozlov et al. Contact and Barrier Dislocation Resistance and their Effect on Characteristics of Slip and Work Hardening. Mater. Sci. Eng. A, 2001, 319-321, 261-265.
6 Н.А. Конева и др. Эволюция дислокационной структуры и стадии пластического течения поликристаллического железо-никелевого сплава. ФММ, 1985, 60, 171-179.
7 E.V. Kozlov et al. Role of Internal Stress Fields at Various Stages of Strain Hardenig. Physics of Metals and Metallography, 2000, 90(l), S59-S67.

МИКРОСТРУКТУРА И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СВАРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ИЗ ТИТАНОВЫХ СПЛАВОВ, ПОЛУЧЕННЫХ ЛАЗЕРНОЙ СВАРКОЙ

Р.В. Сафиуллин, С.П. Малышева, А.Ф. Алетдинов

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
svufa@mail.ru

Титановые сплавы занимают особое место среди конструкционных материалов благодаря уникальному сочетанию высокой удельной прочности, коррозионной стойкости и жаропрочности. Эти свойства, дополненные хорошей свариваемостью и парамагнетизмом, определяют их незаменимость в авиа- и ракетостроении, судостроении, химическом и транспортном машиностроении, где надёжность и минимизация массы изделия являются ключевыми требованиями [1]. Изделия из листовых титановых сплавов в последние годы стали слали чаще получать лазерной сваркой, благодаря максимальной эффективности и высокой производительности, при этом актуальным является вопрос управления их эксплуатационными характеристиками, которые в значительной степени формируются в процессе сварки. Титановые сплавы, в частности псевдо-α-сплав ОТ4-1 и двухфазный (α+β)-сплав ВТ6, отличаются высокой чувствительностью к термическому циклу, быстрый нагрев и охлаждение при лазерной сварке приводят к существенным структурно-фазовым превращениям: росту зерна, изменению объёмной доли β-фазы и возможному образованию игольчатых мартенситных структур. Эти изменения, локализованные в зоне термического влияния и металле шва, формируют неоднородный градиент свойств, определяющий прочность, пластичность и долговечность всего соединения.

В настоящей работе проведены исследования сварных образцов из титановых сплавов ОТ4-1 и ВТ6. полученных лазерной сваркой в различных режимах. Сварка проводилась вручную с использованием системы ручной лазерной сварки P-Weld 1500 на аппарате фирмы ООО Pokkels, а также в автоматическом режиме с использованием коллаборативного робота UR5e. Сварка проводилась в среде аргона, толщина свариваемого материала составляла 0,5-1 мм. Ширина сварного шва 2-4 мм, шов ровный, имеет полный провар, без образования непроваров и трещин. Из сварных листовых пластин вырезались образцы из различных участков для исследования микроструктуры и механических свойств.

Исследование макро- и микроструктуры образцов проводили методом оптической металлографии на микроскопе Olympus 51 и на сканирующем электронном микроскопе MIRA3-TESKAN. При изготовлении шлифов использовались механическая шлифовка, механическая полировка и химическое травление. Измерение микротвёрдости сварных образцов осуществляли на приборе Duramin Struers под нагрузкой 10 Н. Измерение микротвёрдости проводилось по всей длине образцов, в зоне основного материала с шагом в 1 мм, а в зоне сварного шва с шагом в 0,25 мм. Механические испытания образцов на растяжение проводили на испытательной машине марки Instron 5982 с клиновидным захватом при комнатной температуре со скоростью деформирования 1мм/мин. Использовали для каждого состояния по 6 образцов, из которых 3 образца имели сварное соединение в зоне растяжения и 3 образца изготовлены из цельного материала. Рабочая часть образцов 12х5х2мм.

В исходном состоянии листы из сплава ОТ4-1 имеют однофазную псевдо-α мелкозернистую структуру, со средним размером глобулярных зерен 1,98 мкм. В исходном состоянии листы из сплава ВТ6 имеют двухфазную (α+β)-мелкозернистую структуру, со средним размером глобулярных зерен 2,18 мкм, объёмная доля β-фазы в сплаве ВТ6 составила 9,8%, что соответствует типичной двухфазной структуре для данного класса сплавов.

На рис. 1 и 2 приведена макро- и микроструктура стыкового сварного соединения титанового сплава ВТ6.

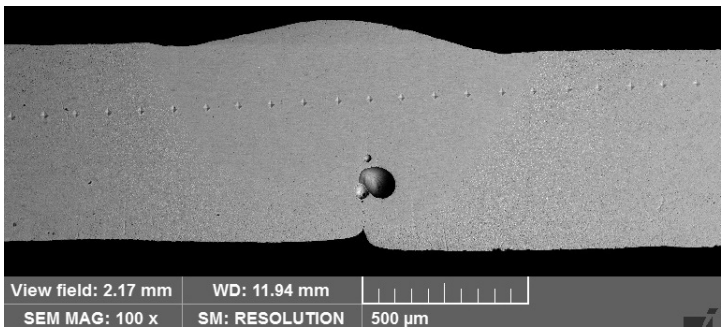
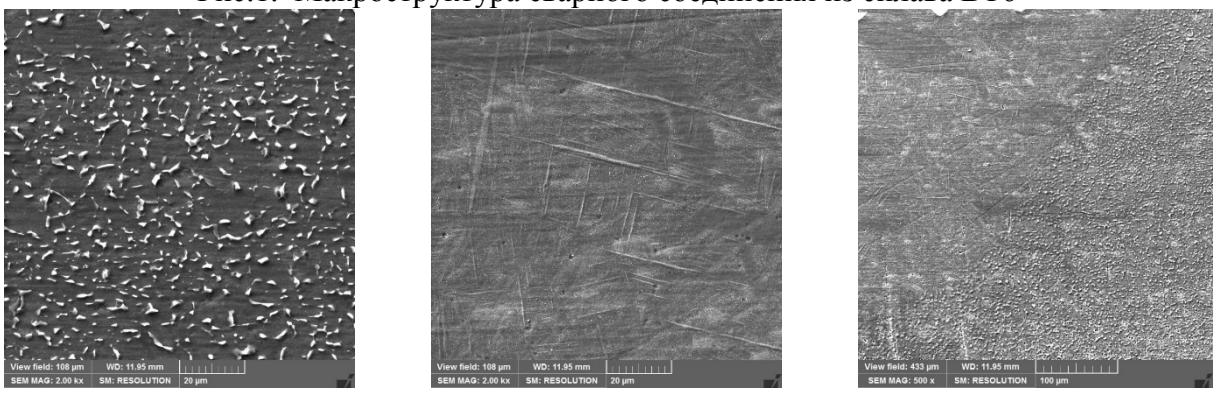


Рис.1. Макроструктура сварного соединения из сплава ВТ6



а б в

Рис. 2. Микроструктура различных участков сварного соединения из сплава ВТ6 (а - основной материал, б - сварной шов, в - переходная зона)

Исследования макро- и микроструктуры образцов из сварных соединений титановых сплавов ОТ4-1 и ВТ6 показали, что соединения получаются в основном качественные, изредка встречаются дефекты в виде единичных пор (рис.1), неметаллические включения в сварном шве во всех исследованных образцах не обнаружены. При исследовании макроструктуры (рис.1) выделяются зона сварного соединения и основной материал. Зона сварки у образцов имеет уширение сверху, что типично для сварных образцов. Зона термического влияния практически отсутствует. В зоне сварки проплавление на всех образцах произошло практически насквозь, снизу в некоторых образцах обнаружены небольшие несплошности (рис.1а), но при подборе соответствующих режимов лазерной сварки в процессе исследования удалось их исключить. Структура зоны сварки во всех образцах пластинчатая (рис. 2б). Структура основного металла соответствует типичной структуре листов из титановых сплавов (рис. 2а), она аналогична исходной микроструктуре. Исследования химического состава основного материала и сварного соединения не выявили существенной разницы.

Результаты измерения микротвердости по длине сварных образцов приведены на рис.3.

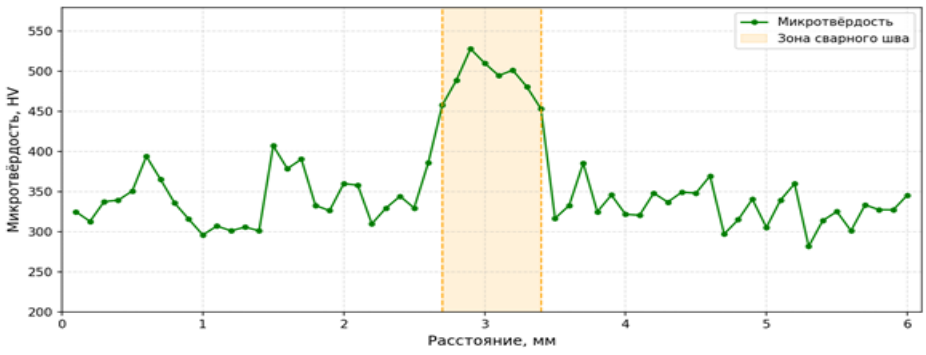


Рис. 3. Микротвёрдость сварного образца из сплава ВТ6

Видно (рис.3), что значения микротвердости в зоне сварного шва увеличиваются по сравнению с значениями основного материала на 20-50%. Это увеличение очень незначительно, что свидетельствует об отсутствии прочных (закалочных) структур в сварном шве и околошовной зоне. По результатам исследования микротвёрдости можно сделать вывод, что микроструктура зоны сварки связана с термическим влиянием и составляет примерно 1-2 мм (рис.3).

В таблице 1 приведены механические свойства сварных по различным режимам и цельных образцов из титановых сплавов временное сопротивление разрыву $\sigma_в$ и относительное удлинение δ.

Таблица 1. Механические характеристики образцов из титановых сплавов, полученных лазерной сваркой

Материал	Состояние	$\sigma_в$, МПа	δ, %
ОТ4-1 толщина 0,5 мм	Сварной, режим 1	708,5	16,0
	Сварной, режим 2	715,2	17,0
	Цельный	667,9	26,4
ВТ6 толщина 0,6 мм	Сварной, режим 3	*782,3*	*5,2*
	Цельный	*809,0*	*19,3*
ВТ6 толщина 1 мм	Сварной, режим 4	*797,3*	*1,18*
	Сварной, режим 5	*759,8*	*1,7*
	Сварной, режим 6	998,3	9,2
	Цельный	*999,0*	*16,7*

В результате проведенных испытаний на растяжение обнаружено, что прочность сварного соединения сплава ОТ4-1 равна прочности основного материала, пластичность составляет 62-65% от пластичности цельного сплава ОТ4-1, что вероятно связано с наличием дефектов в зоне сварного шва. Прочность сварного соединения титанового сплава ВТ6 также находится на уровне цельного материала, а пластичность – значительно меньше, только после подбора различных режимов сварки удалось поднять пластичность сварного соединения из сплава ВТ6 до 56%. Указанные проблемы подлежат дальнейшим исследованиям и подбору оптимальных режимов лазерной сварки.

Таким образом, сварные соединения у большинства исследованных образцов из титановых сплавов ОТ4-1 и ВТ6 с точки зрения микро- и макроструктуры являются качественными. В них отсутствуют сварочные дефекты, сварной шов имеет сравнительно мелкодисперсную игольчатую структуру, а зона термического влияния практически отсутствует. Установлено, что, микротвердость в зоне соединения увеличилась на 20-50% по сравнению с основным материалом. Прочность сварного соединения находится на уровне прочности основного материала, пластичность составляет 56-65%. Требуются еще дополнительные исследования для повышения свойств сварных соединений.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИМСП РАН № 124022900007-9. Исследования выполнены на базе Центра коллективного пользования ИПСМ РАН «Структурные и физико-механические исследования материалов».

ВЛИЯНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА СТРУКТУРУ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА 08Х18Н10Т–WC, ПОЛУЧЕННОГО МЕТОДОМ ПРЯМОГО ЛАЗЕРНОГО ВЫРАЩИВАНИЯ

А.И. Мамалат, Р.В. Мендагалиев, Н.Р. Алымов, Е.В. Земляков, О.Г. Климова-Корсмик

Санкт-Петербургский Государственный морской технический университет, Санкт-Петербург
afrantende@gmail.com

Повышение прочностных характеристик и износостойкости стальных изделий, эксплуатируемых в условиях интенсивных механических нагрузок, является актуальной задачей современного материаловедения. Перспективным способом её решения выступает создание металломатричных композиционных материалов (ММКМ), в которых аустенитная стальная матрица дополнительно упрочняется твёрдыми карбидными частицами. Применение метода прямого лазерного выращивания (ПЛВ) позволяет не только формировать изделия сложной геометрии, но и управлять содержанием упрочняющей фазы непосредственно в процессе синтеза, обеспечивая создание градиентных структур.

Введение частиц карбида вольфрама (WC) в матрицу системы 08Х18Н10Т–WC позволяет существенно повысить твёрдость и прочность материала, однако сопровождается снижением пластичности вследствие деформационной несовместимости фаз и роста локальных напряжений на межфазных границах [1]. Градиентное распределение WC по объёму изделия обеспечивает более благоприятное сочетание прочности и пластичности по сравнению с равномерно высоким содержанием упрочняющей фазы [2]. Именно зона контакта «матрица–WC» выступает основным местом зарождения микротрещин и пор при механическом нагружении [3]. При этом влияние последующей термической обработки на структуру и свойства подобных композитов остаётся малоизученным, что сдерживает разработку научно обоснованных режимов обработки материалов для повышения их эксплуатационных характеристик.

Целью работы является получение и исследование механических свойств композиционного материала системы 08Х18Н10Т–WC, полученного методом ПЛВ, а также оценка влияния термической обработки на его структуру и механические свойства для обоснования режимов обработки планируемой серии градиентных образцов с содержанием WC 1, 5, 10 и 15 масс.%.

Градиентные образцы системы 08Х18Н10Т–WC были получены методом ПЛВ на установке УПЛВ ИЛИСТ-Л при мощности лазерного излучения 2200 Вт, скорости выращивания 25 мм/с и диаметре лазерного пятна 2,6 мм. Содержание WC регулировалось раздельной подачей порошков стали 08Х18Н10Т (фракция 60–160 мкм) и сферического WC (фракция 30–45 мкм) через две независимо настраиваемых колбы порошкового питателя, что обеспечивало изменение концентрации упрочняющей фазы по высоте образца в диапазоне 0–17%. Механические свойства матрицы и композита определяли по результатам испытаний на одноосное растяжение. Для слоя с содержанием 15%WC дополнительно проведена предварительная серия термических обработок: нагрев до 900, 1000, 1100 и 1200 °C, выдержка 1 час, охлаждение на воздухе; твёрдость измеряли методом Виккерса (HV5) в состоянии после ПЛВ и после каждого режима обработки.

Установлено, что увеличение содержания WC приводит к линейному росту предела текучести $\sigma_{0,2}$ — с 385 МПа для матрицы без WC до 920 МПа при 17%WC, — а также к росту временного сопротивления разрыву $\sigma_в$ с 653 до максимальных 988 МПа при 15%WC (рис. 1). Одновременно относительное удлинение δ снижается почти на два порядка — с 79 до 0,5%. Наиболее благоприятное сочетание прочности и пластичности достигается при умеренном содержании WC (около 5%): прирост $\sigma_{0,2}$ составляет около 60%, $\sigma_в$ — около 34% при сохранении удлинения на уровне 52%. При содержании WC 9% и выше пластичность

резко падает, что связано с ростом доли хрупкой карбидной фазы и развитием повреждений на межфазных границах «матрица–WC».

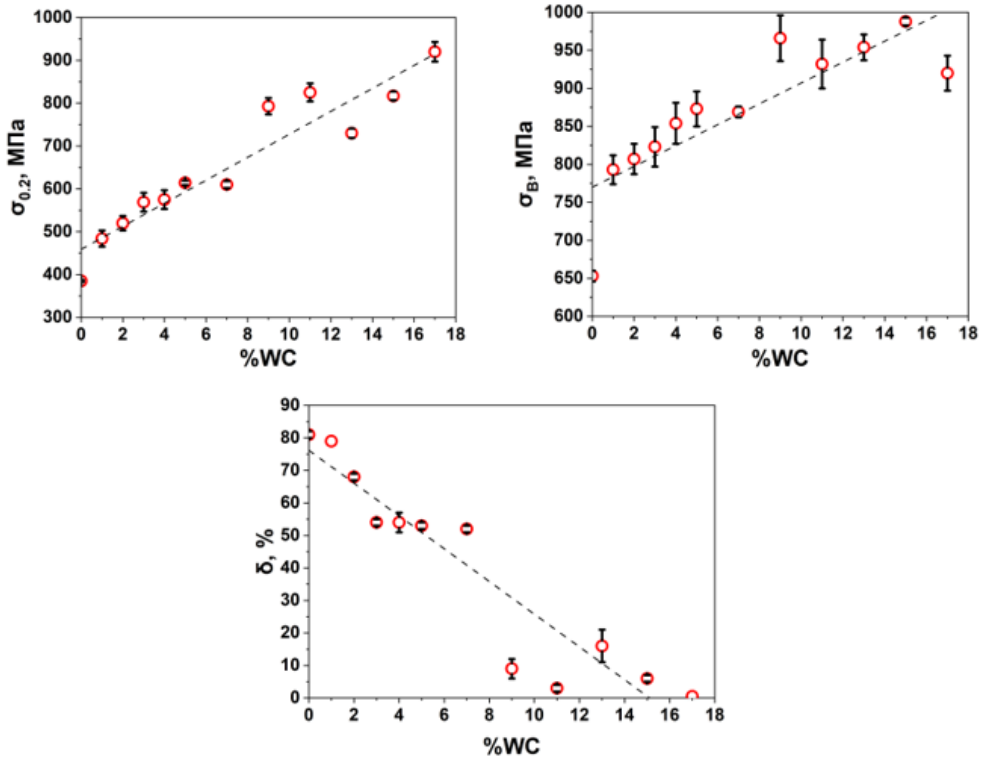


Рис. 1. Зависимость механических свойств ($\sigma_{0,2}$, $\sigma_в$, δ) образцов 08Х18Н10Т–WC от содержания WC

Термическая обработка слоя с 15%WC (рис. 2) приводит к немонотонному изменению твёрдости в зависимости от температуры отжига. В состоянии после ПЛВ твёрдость составляет 381 HV5. Отжиг при 900 и 1000 °C приводит к её росту до максимальных значений 437 и 431 HV5 соответственно, что может быть связано с дополнительным выделением дисперсных карбидных фаз и частичной релаксацией остаточных напряжений при сохранении мелкозернистой структуры. Дальнейшее повышение температуры до 1100 и 1200 °C сопровождается снижением твёрдости до 330 и 298 HV5, что указывает на сегрегацию карбидных частиц и разупрочнение матрицы при высокотемпературном отжиге.

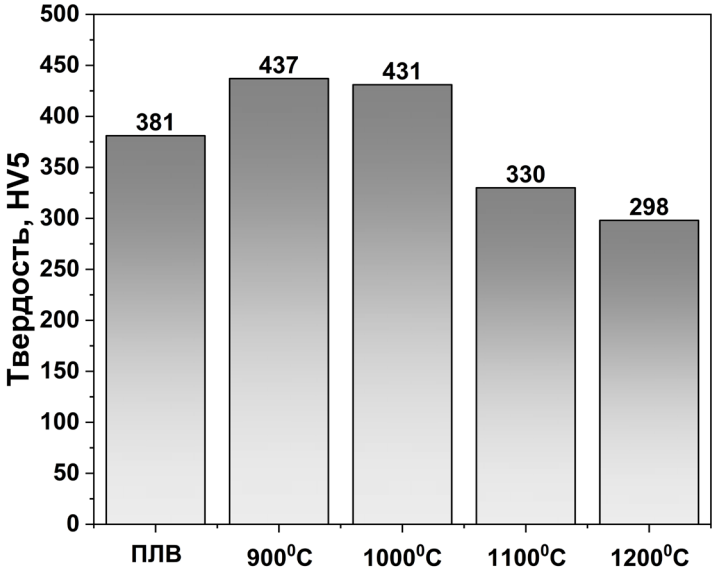


Рис. 2. Зависимость твёрдости HV5 слоя с 15%WC от состояния (после ПЛВ и после термической обработки при 900–1200 °C)

Результаты работы показывают, что увеличение содержания частиц WC в матрице 08Х18Н10Т закономерно повышает прочностные характеристики композита при снижении пластичности; наиболее рациональным с точки зрения баланса свойств является диапазон 1–5%WC.

Предварительные данные по термической обработке слоя с 15%WC демонстрируют немонотонный характер зависимости твёрдости от температуры отжига с максимумом в интервале 900–1000 °C (до 437 HV5), что примерно на 15% превышает твёрдость в состоянии после ПЛВ. Полученные результаты позволяют обосновать выбор диапазона температур термической обработки для серии градиентных образцов с содержанием WC 0, 1, 5, 10 и 15 масс.%.

Благодарности

Исследование выполнено при финансовой поддержке стратегической программы академического лидерства «Приоритет-2030» (соглашение № 075-15-2026-078, проект «Цифровые промышленные технологии»).

Литература

1. H. Li, Y. Hu, R. Di, R. Yuan, C. Shi, J. Lei. Effects of WC particles on microstructure and mechanical properties of 316L steel obtained by laser melting deposition. Ceram. Int., 2022, 48(14) 20388-20399.
2. W. Yang, A. Guo, X. Sheng, R. Tang, P. Qu, S. Wang, C. Liu, L. Yin, S. Sui, S. Guo. Preparation of 316L stainless steel/WC gradient layered structures with excellent strength-elongation synergy using laser powder bed fusion. J. Manuf. Process., 2025, 133 692-704.
3. J. Wang, L. Li, W. Tao. Crack initiation and propagation behavior of WC particles reinforced Fe-based metal matrix composite produced by laser melting deposition. Opt. Laser Technol., 2016, 82 170-182.

ВЛИЯНИЕ НАВОДОРОЖИВАНИЯ НА ФАЗОВЫЙ СОСТАВ, МИКРОСТРУКТУРУ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СПЛАВА Ti-1023

Э.Р. Мамедова[1], Д.О. Стукалин[1, 2], Юечэн Дун[2], И.В. Александров[1]

[1]Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия
[2]Нанкинский технологический университет, Нанкин, КНР
mamedovaelya6@gmail.com

В современной технологичной индустрии высокопрочный титановый сплав Ti-1023, содержащий Ti (85 масс. %), V (10 масс. %), Fe (2 масс. %), Al (3 масс. %), находит широкое применение благодаря уникальному комплексу механических свойств. Однако его промышленное внедрение существенно ограничивается высокой сопротивляемостью деформации и низкой пластичностью в исходном состоянии. Для преодоления этих технологических трудностей перспективным решением является применение наводороживания [1]. Настоящая работа посвящена изучению закономерностей трансформации фазового состава, микроструктуры и механических характеристик данного сплава под воздействием наводороживания.

Результаты структурных исследований показали, что в исходном полученном состоянии сплав обладает гетерогенным строением, где в β-матрице с размером зерна 26 ± 4 мкм присутствует около 5,6 об. % дисперсных частиц α-фазы размером 18 ± 2 мкм. Исследуемые образцы выдерживали в атмосфере водорода (0,1-0,2 атм) при температуре 750 °C в течение двух часов с последующим охлаждением в вакуумной печи сопротивления. По результатам энергодисперсного анализа, выполненного с помощью приставки для растрового электронного микроскопа, содержание водорода в образцах Ti-1023+H составило 0,3 масс. %. Для повышения однородности микроструктуры материала выполняли закалку с 800 °C в воду. Анализ эволюции структурно-фазового состояния осуществлялся комплексом методов, включающих оптическую и растровую электронную микроскопию, а также дифракцию обратно рассеянных электронов.

Внедрение водорода привело к полному исчезновению α-фазы и стабилизации однофазного β-состояния. При этом зафиксирован интенсивный рост структурных элементов: средний поперечный размер β-зерен увеличился почти в два раза до 47 ± 4 мкм. Данные микроструктурные изменения сопровождались выраженным падением микротвердости материала с 388 ± 9 Hv до 248 ± 10 Hv и предела прочности на растяжение с 1300 МПа до 774 МПа при комнатной температуре, при этом пластичность составила 0,5 % (рис. 1). В то же время, для образца, нагретого до 400 °C с целью повышения пластичности в два-три раза, предел прочности составил 587 МПа.

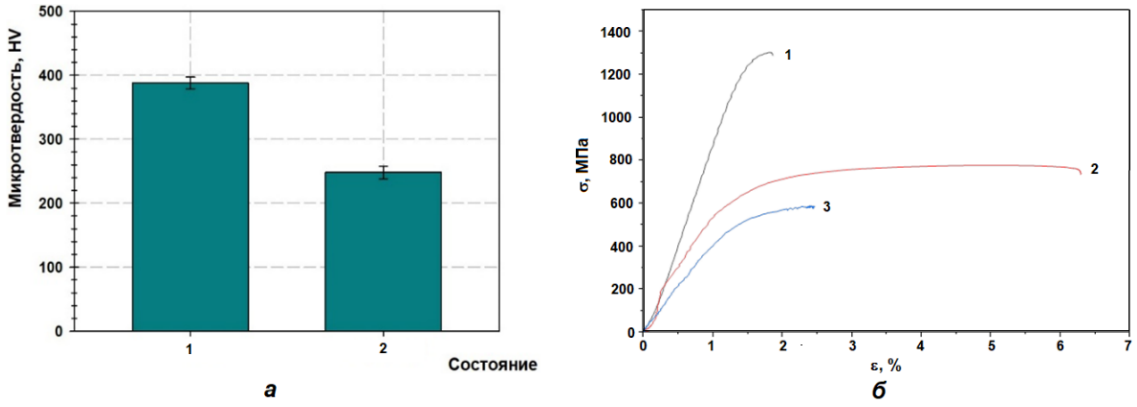


Рис. 1. Влияние наводороживания на микротвердость (а) и прочность (б) образцов сплава Ti-1023: 1 – образец в состоянии поставки, 2 – наводороженный образец при комнатной температуре, 3 – наводороженный образец при температуре 400 °C

Снижение микротвердости на 36 % и предела прочности на 40 % при комнатной температуре связано с тем, что введение водорода в концентрации 0,3 масс. % полностью подавило выделение дисперсных упрочняющих α-частиц при охлаждении сплава Ti-1023. Падение прочностных свойств также свидетельствует о том, что весь водород находится в твердом растворе внедрения внутри β-фазы [2]. Это говорит о высокой стабильности наводороженного твердого раствора в β-фазе при нагреве и возможном частичном динамическом деформационном старении, которое удерживает прочность от резкого обрушения при повышенных температурах.

Одновременное и пропорциональное снижение микротвердости и предела прочности при наводороживании сплава Ti-1023 указывает на то, что в структуре сплава не произошло образования хрупких гидридных фаз, что согласуется с данными микроскопии и дифракции обратно рассеянных электронов, а водород выступил в роли пластификатора, вызвав водородное разупрочнение за счет дестабилизации и изменения объемной доли β-фазы. Введение в титановый сплав водорода можно использовать как временную технологическую операцию, позволяющую снизить прочность и твердость для облегчения механической обработки (резания, штамповки) сплава Ti-1023 с последующим вакуумным отжигом для полного удаления водорода и восстановления (или улучшения) прочностных свойств. Водород необходимо удалять после технологической операции, поскольку при повышенных температурах он работает как пластификатор, а при охлаждении детали до комнатных температур и в процессе эксплуатации водород вызывает резкое падение пластичности. При длительном нахождении водорода в остывающем металле могут выделиться хрупкие гидриды титана, что приведет к разрушению детали под нагрузкой. Для сохранения мелкодисперсной однородной микроструктуры и прочностных свойств сплава Ti-1023 необходимо проводить контролируемый вакуумный отжиг при температурах ниже точки полиморфного превращения.

Литература

1. А.Н. Швецова. Исследование факторов наводороживания титанового сплава типа ВТ14 для изготовления стандартных образцов содержания водорода. Труды ВИАМ, 2026, 6 (160) 65–73. DOI: 10.18577/2307-6046-2026-0-6-65-73.
2. Zh. Liao, W. Li, Y. Yan, J. Wu, T. Jiang, Y. Lang, Sh. Li. Effect of hydrogen content on cold cracks in titanium alloy welding. International Journal of Hydrogen Energy, 2025, 170, 150930.

ВЧ-ПЛАЗМЕННАЯ ПОЛИРОВКА, УПРОЧНЕНИЕ, АЗОТИРОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ДЕТАЛЕЙ И ИНСТРУМЕНТОВ

Абдуллин И.Ш.[1], Мастюков К.Ш.[2], Миронов С.В.[3]

[1]*ООО «Плазма-ВСТ», Казань, Россия*
[2]*Казанский национальный исследовательский технический университет имени А. Н. Туполева — КАИ, Казань, Россия*
[3]*«Казанский национальный исследовательский технологический университет» (ФГБОУ ВО «КНИТУ»), Казань, Россия*
olushax231@gmail.com

Существуют различные виды финишной обработки поверхности металлических изделий: механическая шлифовка, лазерное упрочнение, плазменное напыление, однако они не могут обеспечить улучшение одних характеристик изделия без ухудшения других.

Так, например, при механической шлифовке поверхности металла появляются прижоги и структурные изменения: образования трещиноватого и рельефного слоев на поверхности металла. В зоне шлифования выделяется большое количество тепла. Это приводит к неблагоприятным термодинамическим условиям и вызывает структурные изменения в материале. Прижоги снижают исходную твердость поверхности, ухудшают контактную выносливость и усталостную прочность деталей. Резкий нагрев и охлаждение, а также высокие механические нагрузки становятся причиной образования шлифовочных трещин. Это особенно характерно для высокоуглеродистых легированных сталей и материалов, склонных к хрупкому разрушению. Такие трещины являются опасными концентраторами напряжений. В поверхностном слое возникают неблагоприятные растягивающие остаточные напряжения, которые, в сочетании с трещинами, значительно снижают прочность и долговечность детали [1].

Для лазерного упрочнения характерен риск образования трещин: для высокоуглеродистых сталей (более 0,6% С) характерна проблема технологической прочности. Из-за сверхвысоких скоростей нагрева и охлаждения могут возникать хрупкие межкристаллитные трещины. Это требует тщательного контроля режимов, чтобы не охрупчивать поверхность. Так же действует эффект отпуска ранее обработанных зон: при упрочнении больших поверхностей "дорожками" с перекрытием, последующий проход разогревает и "отпускает" (снижает твердость) ранее закаленную зону. Это приводит к неравномерности свойств по поверхности, что является серьезным технологическим ограничением [2].

К недостаткам плазменного напыления относятся такие факторы как образование пористости, изменение остаточных напряжений, низкая прочность сцепления напыляемого материала к подложке. Покрытия имеют естественную пористость, которая может варьироваться в широких пределах. Высокая пористость снижает защитные свойства покрытия, особенно от окисления и высокотемпературной коррозии. Быстрые термические циклы нагрева и охлаждения, а также разница в теплофизических свойствах материала покрытия и основы приводят к возникновению значительных остаточных напряжений. Это является главной причиной, ограничивающей возможность получения толстых покрытий, и может приводить к их растрескиванию или отслаиванию. Это повышает риск образования износа, что может привести к отказу детали [3].

Модификация при помощи потока низкоэнергетических ионов (ПНЭИ), генерируемых из струйного ВЧ-разряда пониженного давления, позволяет одновременно снизить шероховатость поверхности, увеличить ее микротвердость, а также повышает усталостную прочность [4].

При обработке в струе ВЧ-плазменного разряда пониженного давления в области введенного тела образуется слой положительного заряда. Ионы, попадая из

квазинейтральной плазмы в слой пространственного заряда, разгоняются сильным электрическим полем. Они бомбардируют поверхность изделия с энергией 30–50 эВ. Так как пороговая энергия распыления большинства материалов лежит в диапазоне 13–33 эВ [5 - 7], то энергии, переданной ионами плазмообразующего газа атомам тела, достаточно для распыления адсорбированных частиц и атомов материала с поверхности, локального оплавления микровыступов, удаления примесных дефектов, разупорядочения структуры приповерхностных слоев и развития в них дефектов. Это приводит к очистке поверхности, залечиванию микропор и микротрещин, ликвидации рельефного и трещиноватого слоев, в результате чего изменяются физические свойства поверхности, такие как микротвердость, шероховатость, прочностные показатели.

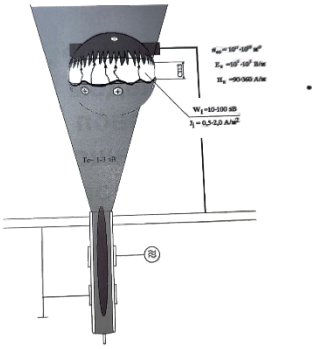


Рис. 1. Процесс распыления микровыступов на поверхности обрабатываемой детали.

При плазменной обработке титановых деталей с азотом происходит образование нитрида титана. Под пленкой нитрида титана обнаруживается обогащенный азотом слой. Графики распределения микротвердости в поверхностном слое образца для обработки с различным содержанием азота в аргоне приведены на рис. 2. Глубина измененного слоя достигает 120 мкм. Повышение микротвердости при достаточном содержании азота происходит вследствие образования слоя нитрида титана и растворения в поверхностном слое азота. При содержании азота $5 \cdot 10^{-3}$% и меньше повышение микротвердости связано с тем, что в результате бомбардировки поверхности ионами в поверхностном слое титана возникают сжимающие остаточные напряжения.

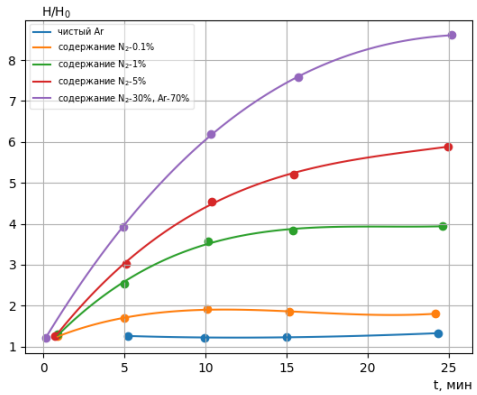


Рис. 2. Относительное изменение микротвердости поверхности в процессе обработки.

Таким образом традиционные методы финишной обработки — механическая шлифовка, лазерное упрочнение и плазменное напыление — имеют существенные недостатки: приводят к прижогам, структурным изменениям, трещинам, эффекту отпуска, пористости и появлениям растягивающих остаточных напряжений.

В отличие от них, обработка потоком низкоэнергетических ионов (ПНЭИ) в струе ВЧ-разряда пониженного давления позволяет одновременно снизить шероховатость, увеличить микротвердость и повысить усталостную прочность. Физический механизм основан на формировании слоя положительного пространственного заряда, в котором ионы ускоряются до 30–50 эВ и бомбардируют поверхность, улучшая параметр шероховатости на 2 класса.

Глубина измененного слоя достигает 120 мкм, а микротвердость повышается в 7-8 раз при обработке детали в струе ВЧ-плазмы смеси аргона и азота в соотношении 70/30 соответственно.

Список литературы

1. Д.В. Лоцко, Ю.В. Мильман, Н.М. Торчун. Механизм абразивного износа и структура поверхности кристаллических материалов после абразивной обработки. Поверхность. Физика, химия, механика. - 1984. 136-141.
2. А. В. Сажин, А. Н. Кирилина. Исследование проблем управления режимами лазерного термического упрочнения. E-Scio. 2019. 6 (33).
3. S.O. Jeje, P. Mpofu, Malatji N. *et al.* Multi-Principal Element Alloy Coatings: A Review of Deposition Techniques, Applications, and Future Prospects. *Met. Mater. Int.* 31, 3113–3157 (2025).
4. И.Ш. Абдуллин, В.С. Желтухин, Н.Ф. Кашапов Высокочастотная плазменно-струйная обработка материалов. Теория практического применения. Казань, издательство КФУ – 348 с.
5. Р. Бериш. Распыление твердых тел ионной бомбардировкой. Вып. I. Физическое распыление одноэлементных твердых тел. М.: Мир, 1984. 336 с.
6. Р. Бериш. Распыление твердых тел ионной бомбардировкой. Вып. II. Распыление сплавов и соединений, распыление под действием электронов и нейтронов, рельеф поверхности. М.: Мир, 1986. 488 с.
7. Фундаментальные и прикладные аспекты распыления твердых тел. - М.: Мир, 1989. 256 с.

ДИАГНОСТИРОВАНИЕ СВОЙСТВ СВЕРХТВЕРДЫХ МАТЕРИАЛОВ

М.Ш. Мигранов, М.П. Козочкин, А.М. Мигранов

Московский государственный технологический университет «СТАНКИН», Москва
migmars@mail.ru

В условиях современного машиностроительного производства все большее применение находят инновационные технологии диагностирования и мониторинга эксплуатационных свойств сверхтвердых материалов, используемых в качестве режущего инструмента, методами акустической эмиссии (АЭ) при лезвийной обработке резанием. В работе для повышения эффективности диагностирования акустической эмиссией используется обработка концентрированным потоком энергии (КПЭ) исследуемой поверхности металлорежущего инструмента. Применение сигналов АЭ, как инструмента при неразрушающем контроле целого ряда технологических процессов завоевало как наиболее перспективных для обработки резанием [1 - 3]. Такая информация свидетельствует о том, что параметры сигналов АЭ могут применяться не только для мониторинга технологического процесса, но и использоваться в качестве инструмента познания процессов, происходящих в материале при воздействии на него КПЭ. Это важно, поскольку лабораторный анализ состава и структуры материала после обработки КПЭ не всегда позволяет восстановить временной ряд происходящих преобразований.

В условиях возрастающей потребности машиностроительного производства и других областей промышленности в разработке и внедрении уникальных сплавов с особыми специальными физико-техническими характеристиками, становится актуальным исследование и широкое внедрение технологии на основе КПЭ. Это говорит в пользу того, что изучение явлений, сопровождающих воздействие КПЭ на актуальные для промышленности материалы особенно важно в настоящее время, когда во всем мире идут исследования возможностей проектирования новых сплавов с управляемыми свойствами, предназначенных для работы в условиях экстремальных температур и нагрузок, где традиционные композиции уже не справляются.

Проведенные предварительные исследования взаимосвязи основных функциональных характеристик процесса АЭ при различных режимах технологии КПЭ, в последующем позволит использовать сигналы АЭ, как инструмент для изучения динамики явлений с возможностью применения их для усовершенствования как самого технологического процесса, так и тестирования состояния поверхностного слоя обрабатываемой детали [4, 5].

Для проведения исследований связи характеристик АЭ и производительности лазерной обработки использовались (рис.1): а) лазерная установка «SharpMark Fiber GT 60» с рабочей платформой; б) зажатая в тисках (2) исследуемая твердосплавная пластина (3) и прикрепленные акселерометры (4). Характеристики лазерной установки в табл.1 и акселерометра в табл.2.

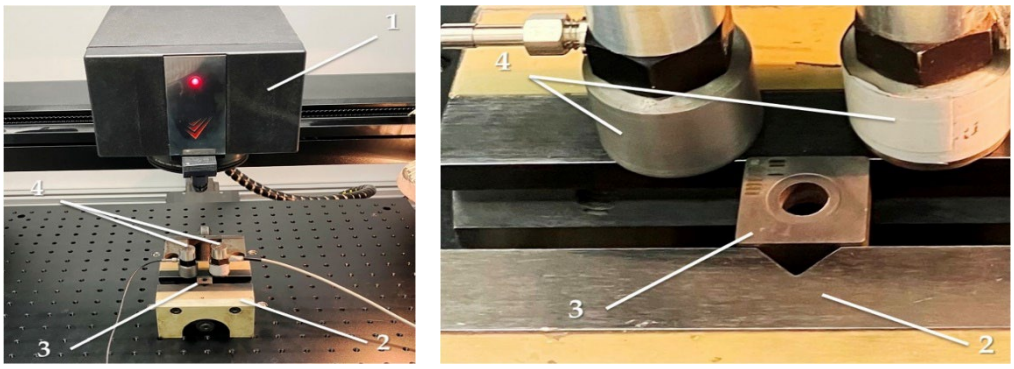


Рис. 1. Экспериментальная установка для исследований

Таблица 1. Технические характеристики лазерного модуля

Тип лазера	Импульсный волоконный лазер
Рабочая длина волны излучения, nm	1064
Максимальная мощность, Вт	60
Энергия в импульсе излучения, мДж	2
Длительность импульса, ns	От 2 до 500
Программное обеспечение	SHARPLASE SOFT^{TM} на базе C++

Таблица 2. Технические характеристики акселерометра

Акселерометр модель АР2037-100			
K_N	Коэффициент преобразования	10	мВ/м/с²
f	Линейный диапазон частот	0,5...15000	Гц
f_R	Резонансная частота в осевом направлении (более)	45	кГц
Δ	Уровень шума, СКЗ [1 Гц ÷ 10 кГц] (менее)	0,0035	м/с²

Сигналы с акселерометров записывались на компьютер для дальнейшего анализа. В табл. 2 указан линейный частотный диапазон только до 15 кГц. Это означает, что в этом диапазоне можно оценивать вибрации в единицах ускорения. Сравнительную оценку акустической активности объекта можно проводить и в более высоком частотном диапазоне, но при сохранении одинаковых граничных частот выбранной полосы. Исследования проводились для оценки связей параметров АЭ с производительностью лазерной обработки и качеством получаемых поверхностей. С этой целью был проведен эксперимент по воздействию лазерными импульсами с различной мощностью и длительностью на поверхность пластин из твердого сплава Т15К6. Условия и результаты эксперимента представлены в табл. 3. В таблице представлены 12 режимов обработки пластины из Т15К6 (79 % WC, 15 % TiC). Лазерные импульсы подавались с частотой 2 кГц с разной длительностью и мощностью. Формировалась строчка из 10 лунок, по этим лункам делалось 5 проходов с выбранными режимами. Режимы эксперимента и полученные результаты показаны в таблице 3.

Таблица 3. Результаты экспериментов сплава Т15К6

№	τ, *ns*	*N, W*	A_1, *mV*	A_2, *mV*	Q, μm^3	*V*, %
1	500	60	166	100	25900.0	12
2	500	50	110	70	20277,9	13
3	500	40	60	35	12079	25.2
4	500	30	22.2	13	5966	45.7
5	350	60	84.7	42.4	12999	22.9
6	350	50	49.7	26.2	9670	25.3
7	350	40	22.4	12.8	4857	50.2
8	350	30	7.7	4.14	781,8	157.5
9	250	60	72.4	42	10819	7.3
10	250	50	40.1	27.5	6456	44.1
11	250	40	15.4	12.8	3258	62.8
12	250	30	3	2.3	346	211.6

Примечания к таблице 3: τ – длительность импульса; N – мощность лазерного импульса; A_1 – *RMS* амплитуда сигнала АЭ в диапазоне 10-28 кГц; A_2 – *RMS* амплитуда сигнала АЭ в диапазоне 32-70 кГц; Q – объем лунки; V – объем выбросов материала на поверхность в процентах от Q.

Заключение

По результатам проведенных исследований акустических откликов установлено, что применение АЭ позволяет получить полезную информацию о кинетических особенностях происходящих явлений, в частности различия методов энергетической обработки зеркально отражаются в параметрах АЭ; переменность плотностей мощности коррелируема с деформацией амплитудного спектра АЭ; полученные данные экспериментальных исследований АЭ могут быть применимы при мониторинге в «on-line» режиме; необходимо проведение дальнейших исследований в этом направлении.

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 22-19-00670-П).

Литература

1. Ф.Я. Балицкий, М.А. Иванова, А.Г. Соколова, Е.И. Хомяков, Виброакустическая диагностика зарождающихся дефектов. М: Наука, 1984. 120 с.
2. М.Д. Генкин, А.Г. Соколова, Виброакустическая диагностика машин и механизмов. М: Машиностроение, 1987. 288 с.
3. M.P. Kozochkin, F.S. Sabirov, Vibroacoustic diagnostics of spindles. Russian Engineering Research. 2009, 29(8), 827-830.
4. С.Н. Григорьев, В.Д. Гурин, М.П. Козочкин и др. Диагностика автоматизированного производства. - М: Машиностроение, 2011– 600 с.
5. А.Г. Григорьянц, Основы лазерной обработки материалов. Москва: Машиностроение, 1989. 300 с.

ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫЕ ИЗНОСОСТОЙКИЕ ПОКРЫТИЯ ДЛЯ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ОБРАБОТКИ РЕЗАНИЕМ

М.Ш. Мигранов, А.М. Мигранов

Московский государственный технологический университет «СТАНКИН», Москва
migmars@mail.ru

Особенностью современного машиностроительного производства является необходимость разработки и применения высокоэффективного металлорежущего инструмента, как наиболее слабого звена технологической цепочки при наличии высокоскоростного металлообрабатывающего оборудования с различными системами управления, а также за последние годы приобрела положительная динамика как по состоянию, так и уровню технологий нанесения износоустойчивых покрытий из – за возможности все большего применения уникальных высокопроизводительных ионно – плазменных вакуумных установок, позволяющие использовать несколько катодов – мишеней с различным химическим составом элементов и разными комбинациями их работы. При этом обеспечивается возможность получения мультикомпонентных по составу износостойких покрытий (ИП) с различными функциональными свойствами (триботехнические, температурно- силовые и др.). В работе рассмотрены и представлены результаты по разработке эффективных составов, рецептур и толщин ИП на основе различных композиций нитридов системы титан – алюминий – хром – цирконий – кремний для нанесения на твердосплавной инструмент группы ВК на вакуумно – дуговых установках. Использование различных нитридных покрытий на основе *TiAlN* является хорошо зарекомендовавшим себя методом для работы в тяжелых производственных условиях, когда инструмент может подвергаться значительному износу при высоких температурах, возникающих из-за высоких скоростей резания, а также в виду формирования защитных структур с высокой твердостью, хорошей стойкостью к окислению и усталостному разрушению. Существуют различные варианты улучшения механических и трибологических свойств покрытий *AlTiN*, в частности, для улучшения их характеристик рассматривают многослойные структуры нанометрового масштаба. Например, повторение слоев *AlTiN* и *ZrN* оказывает важное влияние на структуру интерфейса. Комбинирование покрытий *ZrN* и *AlTiN* в виде многослойных композиций *AlTiN/ZrN* демонстрировало более высокие механические свойства, чем однослойные. В слоях покрытий *AlTiN/ZrN* наблюдался эпитаксиальный рост зерен *ZrN*. Добавление *ZrN* к *AlTiN* способствовало образованию кубических доменов, и замедляет образование стабильного н**итрида алюминия со структурой вюрцита** *AlN* при нагреве — это термодинамически стабильная при нормальных условиях гексагональная модификация соединения алюминия с азотом [1 - 5]. Исследование зависимости механических свойств *AlTiCrN* и многослойного *AlTiCrN/TiSiN* от чередования слоев показало, что многослойное покрытие *AlTiCrN/TiSiN* с промежуточными *CrN* и переходным многослойным покрытием *AlTiN/CrN* обладает улучшенными свойствами при ударной нагрузке, соответствующие таким операциям как фрезерование, сверление и др. [1,4].

Согласно [1, 4, 5], добавление кремния способствует формированию морфологии нанокомпозитного покрытия, состоящего из кристаллических зерен TiAl(Si)N с аморфной фазой SiN_x. При этом достигается эффект измельчения кристаллических зерен, что приводит к улучшению механических свойств, а образование фазы SiO_x во время окисления повышает стойкость покрытия к окислению. Установлено, что эти комбинированные эффекты обусловливают повышенную износостойкость нанокомпозитных покрытий по сравнению с износостойкостью базового нитридного покрытия [4].

В работе было реализовано нанесение различных покрытий с дополнительным содержанием хрома, циркония и других элементов на установках серий ННВ – 6.6 И1 и

«*Platit*»: *AlTiN; AlCrN/SiN; AlTiN/SiN; TiN-AlTiN/SiN; (TiCrAl)N; (TiCrAlSi)N; (ZrCrAl)N; (ZrMoAl)N; (ZrMoHfCrAl)N*.

В настоящее время количественно оценить все триботехнические характеристики высокотемпературного контактного взаимодействия сложно и поэтому в исследованиях при разработке инновационных износостойких покрытий для твердосплавного инструментального материала, а также для прогнозирования и оперативного контроля их эксплуатационных свойств наиболее эффективно оценка адгезионной составляющей касательных напряжений при трении использовали установку, позволяющую определить параметры фрикционного контакта при повышенных температурно – силовых условиях.

Для проведения серии экспериментальных исследований разрабатываемых функциональных многослойных композиционных износостойких покрытий с различным составом и формированием эффективных типовых архитектур разработана комплексная методика.

На предварительном этапе выполнены трибологические испытания композиционных износостойких покрытий: *AlTiN; AlCrN/SiN; AlTiN/SiN; TiN-AlTiN/SiN; (TiCrAl)N; (TiCrAlSi)N; (ZrCrAl)N; (ZrMoAl)N; (ZrMoHfCrAl)N* на двух типах трибометров: универсальном трибометре «*Nanovea*» TRB и высокотемпературной адгезионной установке (адгезиометр) [4, 5].

Для оценки эксплуатационных характеристик разрабатываемых износостойких покрытий на основе различных композиций нитридов тугоплавких металлов при лезвийной обработке резанием сплава ЭК171 - ИД, были проведены серии испытаний с использованием твердосплавного инструмента: четырехгранные пластины для токарной обработки и четырехперьевые фрезы диаметрами 12 мм и 20 мм с исследуемыми износостойкими покрытиями *(AlTiN; AlCrN/SiN; AlTiN/SiN; TiN-AlTiN/SiN; (TiCrAl)N; (TiCrAlSi)N; (ZrCrAl)N; (ZrMoAl)N; (ZrMoHfCrAl)N)*.

При исследовании зависимости эксплуатационных свойств (износ по задней поверхности ($h_з$, мм); период стойкости (T, мин.); температура (θ, °С) и тангенциальная составляющая усилия резания (P_z, Н) разрабатываемых износостойких покрытий на режущем инструменте для высокоскоростного продольного точения были проведены серии натурных экспериментов на токарно – винторезном станке 16К20Т1 с системой тиристорного управления бесступенчатым обеспечением частот вращения обрабатываемой заготовки.

Торцевое высокоскоростное фрезерование концевыми фрезами с разрабатываемыми исследуемыми износостойкими покрытиями осуществляется на консольном фрезерном станке «*FRITZ HECKERT FQS 400*» с комплектом контрольно – измерительного оборудования на износостойкость, влияния и изменение температуры и силы.

Анализ проведенных трибологических исследований на обеих установках в широком диапазоне изменения температурного режима при постоянстве удельной нагрузки на пятно контакта для всех испытуемых покрытий позволило установить, что

- зависимости «коэффициент трения - износостойкое покрытие» носят экстремальный характер и имеют минимальное значение при покрытиях с основой нитридов алюминия и титана (*AlTiN/SiN; TiN-AlTiN/SiN и AlTiN*);

- износостойкие покрытия на основе нитридов алюминия и титана (*AlTiN/SiN; TiN-AlTiN/SiN и AlTiN*) в условиях повышенной температурно – силовой нагруженности контактной зоны в трибосопряжениях способствуют снижению коэффициента трения и это согласно предварительным исследованиям, связано с образованием оксидов алюминия и титана с особой аморфноподобной структурой, обладающих повышенными упрочняющим и смазывающим эффектами.

Анализ экспериментальных исследований температуры (Θ) и тангенциальной составляющей усилия резания (P_z) как при продольном точении, так и при торцевом фрезеровании показал, что наиболее предпочтительными с точки зрения температурно – силовой нагруженности контактной зоны являются износостойкие покрытия: *AlTiN/SiN; TiN-*

AlTiN/SiN и *AlTiN* обеспечивающие в среднем снижение температуры и тангенциальной составляющей усилия резания при точении на 13% и 21 %; на фрезерной обработке от 10% до 30%.

Заключение

Проведенные экспериментальные исследования триботехнических характеристик на трибоустановках; температурно – силовых параметров и износостойкости металлорежущих инструментов с многослойными наноструктурированными покрытиями при продольном точении и встречном фрезеровании позволили установить, следующее:

1. Наилучшими трибологическими характеристиками, и как следствие повышенной износостойкостью и увеличением величины периода стойкости инструментов с благоприятными температурно – силовыми условиями обладают наноструктурированные композитные покрытия серии: *AlTiN/SiN; TiN-AlTiN/SiN и AlTiN*;

2. Исследование температуры резания (Θ) как при продольном точении, так и при встречном фрезеровании инструментом с испытуемыми износостойкими покрытиями показали монотонно возрастающий характер с повышением скорости резания, а отдельный сравнительный анализ уровней температур при резании наиболее благоприятен при использовании покрытия *AlTiN/SiN*;

3. Анализ тангенциальной составляющей усилия при резании (P_z) в широком диапазоне изменения скорости резания для всех исследуемых покрытий показал монотонное снижение и наименьшие значения обеспечиваются покрытиями с алюминиево – титановой основой;

4. Применение при высокоскоростной обработке резанием жаропрочных сплавов многослойных наноструктурированных износостойких покрытий *AlTiN/SiN; TiN-AlTiN/SiN* и *AlTiN* на режущем инструменте позволит в среднем повысить производительность процесса на 20 – 25% при обеспечении требуемых показателей качества обработанной поверхности.

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 22-19-00670-П).

Литература

1. Верещака А.А., Григорьев С.Н., Табаков В.П. Многослойные наноструктурированные износостойкие покрытия для металлорежущего инструмента. М: Инфра – Инженерия, 2025. 344с.
2. Y.-Y. Chang, C.-J. Wu. Mechanical properties and impact resistance of multilayered TiAlN/ZrN coatings, Surf. Coat. Technol. 2013, 231, 62–66.
3. S. Daryoush, H. Mirzadeh, A. Ataie. Amorphization, mechanocrystallization and crystallization kinetics of mechanically alloyed AlFeCuZnTi high-entropy alloys. Lett. Mater., 2022, 307, 131098.
4. М.Ш. Мигранов Инновационные покрытия и смазки для высокотемпературных трибосопряжений. Старый Оскол: ТНТ, 2026. 288 с.
5. Б.Я. Мокрицкий, Э.С. Ситамов, Концептуальные проблемы разработки и упрочнения лезвийного металлорежущего инструмента. ISBN:9785466048285. Изд-во КноРус. 2024. 164 с.

ИССЛЕДОВАНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ И МИКРОТВЕРДОСТИ ТОНКОЛИСТОВЫХ ЗАГОТОВОК ИЗ НИКЕЛЕВОГО СПЛАВА ЭК61, ПОЛУЧЕННЫХ ЛАЗЕРНОЙ СВАРКОЙ

Д.А. Минюкевич[1, 2], Р.Р. Габбасов[1], А.А. Тагирова[1], Э.В. Галиева[1], Р.В. Сафиуллин[1], В.А. Валитов[1]

[1]Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
[2]Уфимский университет науки и технологий, Уфа
Mityaichik2004@gmail.com

Одной из актуальных задач современного авиадвигателестроения является создание надежных неразъемных соединений из жаропрочных никелевых сплавов. Перспективным методом для соединения тонкостенных деталей является лазерная сварка, которая обеспечивает высокую концентрацию энергии, минимальную зону термического влияния (ЗТВ) и низкий уровень остаточных деформаций [1, 2].

В данной работе исследована возможность получения сварных соединений тонколистовых заготовок (толщиной 1,1 мм) из жаропрочного никелевого сплава ЭК61 с ультрамелкозернистой структурой, сформированной методом всесторонней изотермической ковки. Лазерную сварку в автоматическом режиме проводили без присадочного материала.

В результате лазерной сварки обеспечивается сквозное проплавление материала. В сечении сварного соединения выделяются три характерные зоны: сварной шов (зона, где произошло расплавление), зона термического влияния, в которой произошли структурные изменения вследствие нагрева, и основной металл (зона, где сохранилась исходная микроструктура). В зоне шва формируется типичная для быстрой кристаллизации дендритная структура, ориентированная по направлению теплоотвода. В зоне термического влияния наблюдается градиентная структура: от крупных зерен γ-фазы вблизи границы сплавления до исходной ультрамелкозернистой структуры дуплексного типа (γ-фаза + δ-фаза (Ni_3Nb)), характерной для основного металла. Микротвердость в зоне сварного шва и зоне термического влияния снижается на 25–30% по сравнению с основным металлом, что связано с растворением δ-фазы в процессе нагрева и формированием неравновесной литой структуры.

Таким образом, в работе продемонстрирована эффективность применения лазерной сварки для получения сварных соединений тонколистовых заготовок из жаропрочного никелевого сплава ЭК61.

Литература

1. D.K. Starovoitov, R.A. Latypov, A.A. Cherepakhin. Laser Welding of Parts Made of EK-61 Alloy Made by Direct Laser Growing Method. Lect. Notes Mech. Eng., 2024, 921–930.
2. S.A. Patil, A. Jha, P.S. Gan. A study on laser welding of Inconel 718 and evolution of strain field using digital image correlation to estimate the localized properties. Opt. Laser Technol., 2025, (184) 112472.

ИССЛЕДОВАНИЕ ДЕФЕКТА СВАРНОГО ШВА СТАЛИ A671 GR. CC 60

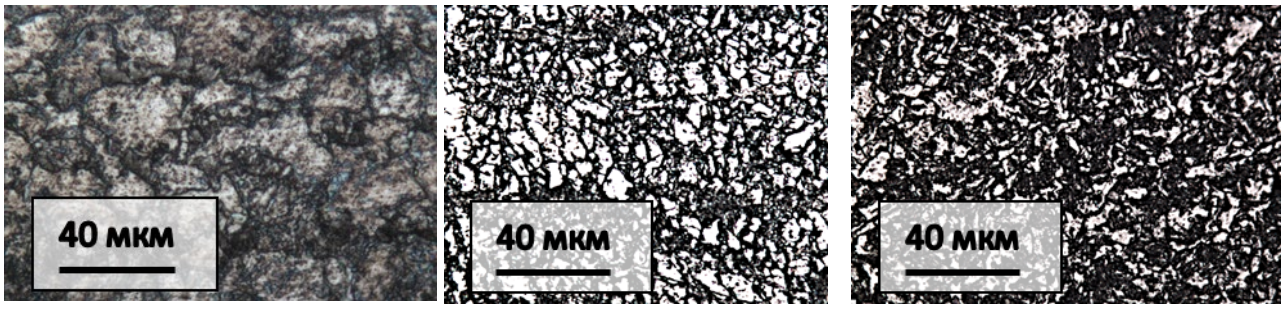
Р.Э. Миргаязов, М.А. Бикмухаметова

Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа, Россия
4141145@list.ru

В настоящей работе представлены результаты исследований механических свойств материала паропровода - стали A671 Grade CC 60 (российский аналог - Ст3сп), при эксплуатации которого имели место повторяющиеся дефекты типа прогар сварного шва.

Для исследования изготовлены три группы образцов из стали A671 Gr. CC 60: (1) без видимых дефектов (эталон), (2) с прогаром сварного шва, (3) с прогаром и развитой трещиной по шву. Химический состав контролировали методом оптической эмиссионной спектроскопии. Твердость измеряли по Виккерсу при нагрузке 30 кгс в различных зонах соединения. Микроструктуру изучали на оптическом микроскопе после травления в 4%-ном растворе HNO_3, балл зерна определяли по ГОСТ 5639. Механические испытания на растяжение проводили на универсальной машине при комнатной температуре с фиксацией диаграммы деформирования.

Химический состав всех образцов соответствовал требованиям к стали A671 Gr. CC 60, отклонений не обнаружено [1]. Микроструктура эталонного образца - феррито-перлитная смесь с баллом зерна 7-8 (рис. 1а), что является нормой для проката. В образце с прогаром зафиксировано существенное измельчение зерна (балл 10-11) в зоне термического влияния (рис. 1б), что свидетельствует о перегреве металла выше температуры полной аустенитизации (Ac_3) с последующим ускоренным охлаждением. В образце с трещиной микроструктура вблизи дефекта характеризовалась наличием игольчатых ферритных и бейнитных участков, что указывает на локальные закалочные эффекты (рис. 1в).



а б в

Рис.1. Микроструктура A671 Gr. CC 60 при увеличении 500х в бездефектном состоянии (а), в зоне прогара (б), в месте трещины (в).

Результаты измерений твердости представлены в таблице 1.

Таблица 1. Твердость HV в различных зонах сварных соединений

Образец	Зона замера	Твердость, HV
Без дефекта	Основной металл	148
	Околошовная зона	184
С прогаром	Основной металл	157-165
С прогаром и трещиной	Основной металл	146
	Околошовная зона	155
	Сварной шов	170
	Непосредственно у трещины	232

Наибольшая твердость (232 HV) зафиксирована в зоне, прилегающей к трещине, что почти на 60% превышает твердость основного металла (146 HV) и значительно выше значений для эталонного соединения. Такой рост твердости традиционно связывают с высокой плотностью дислокаций, формированием мартенситно-бейнитных структур и наклепом, возникающим при термическом воздействии [2].

Результаты испытаний на растяжение приведены в таблице 2.

Таблица 2. Механические свойства при растяжении

Параметр	Без дефекта	С прогаром
Предел прочности $\sigma_в$, Н/мм^2	460	517
Условный предел текучести $\sigma_{0,2}$, Н/мм^2	426	384
Относительное удлинение δ, %	50,0	85,0
Относительное сужение ψ, %	33,7	38,6
Модуль упругости E, Н/мм²	889	871

Макроскопический осмотр разрушенных образцов и фотографии трещин (рис. 1-2) показывают, что трещина зарождается с внутренней поверхности трубы в корне шва и распространяется по сечению, имея характерный хрупкий излом с небольшими участками вязкого разрушения.

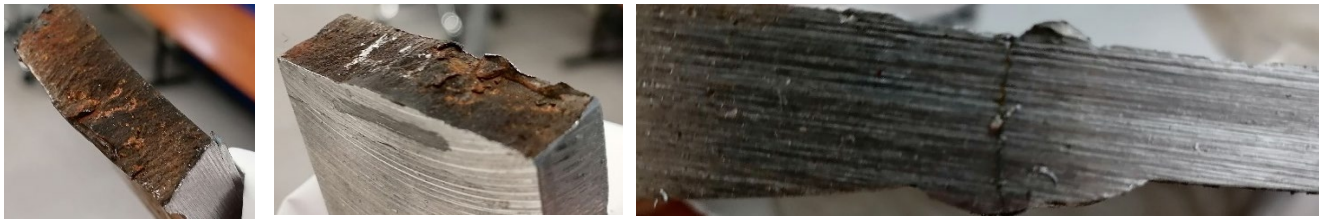


Рис. 2. Трещина в сварном шве

Полученные результаты позволяют предположить: имело место нарушения режима сварки - избыточная погонная энергия или недостаточная скорость - привело к сквозному проплаву (прогару). В зоне перегрева (ЗТВ) произошло сильное измельчение зерна (балл 10-11) и образование неравновесных фаз, что вызвало повышение твердости и одновременно снижение пластичности и вязкости. Сочетание остаточных сварочных напряжений, структурного охрупчивания и температурных напряжений привело к зарождению микротрещины, которая затем распространилась по наименее вязкой зоне - вблизи прогрева. Растущая трещина дополнительно наклепывает металл у своего фронта, что объясняет экстремальную твердость 232 HV.

Сравнение с эталонным образцом показывает, что даже при отсутствии видимых дефектов сварное соединение имеет повышенную твердость в околошовной зоне (184 HV), что говорит о некотором упрочнении, вызванном термическим циклом сварки.

Литература

1. ГОСТ Р 71991-2025 Трубы стальные сварные, полученные методом дуговой сварки под флюсом, для эксплуатации в условиях пониженных температур. Технические условия. Введен 18.04.2025. М., 2025, 24 с.
2. Ю. Н. Сараев, В. П. Безбородов, Сварочное производство. 2012, 8, 3-5.

ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ АЛЮМИНИЯ С ПОВЫШЕННЫМ СОДЕРЖАНИЕМ Mn

А.В. Михайловская, О.А. Яковцева, Т.М. Марданшина, А.Г. Мочуговский

НИТУ МИСИС, Москва
mihaylovskaya@misis.ru

Ограниченная номенклатура легких сплавов с достаточными прочностными характеристиками в широком интервале температур, является актуальной проблемой современного металловедения, сдерживающей развитие промышленности. Наибольший объем производства приходится на сплавы 3XXX серии системы Al-Mn [1, 2]. Распад в сплавах данной системы сопровождается выделением пластинчатых частиц фазы Al_6Mn с орторомбической решеткой, размер которых зависит от режима обработки и при стандартных высокотемпературных режимах обработки достигает 100-500 нм [3, 4]. Легирование алюминиевых сплавов Mg [5, 6] или Cu совместно с Be [7 – 10] обеспечивает формирование при температурах отжига 300-400 °C околоравноосных выделений икосаэдрической квазикристаллической I-фазы размерами 20-40 нм. Последние существенно повышают температуру начала рекристаллизации, термическую стабильность зеренной структуры и прочностные характеристики [7, 9]. Дополнительный существенный эффект можно обеспечить введением циркония и РЗМ, формирующих дисперсоиды упорядоченной $L1_2$ Al_3Zr/Al_3(РЗМ,Zr) фазы, выделения которой имеют размер 5-20 нм, что также определяется режимом обработки [10].

В докладе представлен анализ микроструктуры и механических свойств, термически не упрочняемых при низкотемпературном старении сплавов на основе алюминия с Mn в качестве основного легирующего элемента, дополнительно содержащих Cu или Mg, Zr, редкоземельные элементы и/или малые добавки легкоплавких элементов (иносулантов). Структура и свойства сплавов определяются плотностью распределения продуктов высокотемпературного старения, вышеописанных Mn- и Zr- содержащих фаз и режимами обработки. Сплавы получены термомеханической обработкой, включающей всестороннюю осадку при 300 °C с накопленной деформацией $\Sigma e=12$ или последовательно горячую и холодную прокатку. В работе проанализировано влияние состава сплавов и режимов обработки на формирование микроструктуры, твердость, механические свойства и деформационное поведение при повышенной температуре, дана количественная оценка зернограничного скольжения в условиях близких к поёлзучести.

Применение ковки формирует ультрамелкозернистую структуру со средним размером зерна около 1 мкм. Сплавы, подвергнутые прокатке, имеют нерекристаллизованную структуру в интервале температур 300–450 °C. Термическая стабильность зеренной структуры в указанном интервале температур в обоих случаях обеспечена выделениями икосаэдрической I-фазы в сплавах с магнием и дополнительно T ($Al_{20}Cu_2Mn_3$) фазы в сплавах с медью, плотность распределения которой повышается при введении иносулантов, а средний размер не превышает 50 нм.

При комнатной температуре предел текучести сплавов варьируется от 230 до 360 МПа, предел прочности от 280 до 390 МПа, при 250 °C от 110 до 200 МПа, предел прочности от 160 до 220 МПа в зависимости от состава и режимов обработки. При этом, наибольший уровень показателей имеют сплавы с добавками циркония, или циркония совместно с эрбием и малыми добавками иносулантов, ввиду роста плотности распределения Mn-содержащих фаз. Сопротивление ползучести при температуре 250 °C и нагрузке 0,4 от предела текучести также выше в сплавах с добавками легкоплавких элементов.

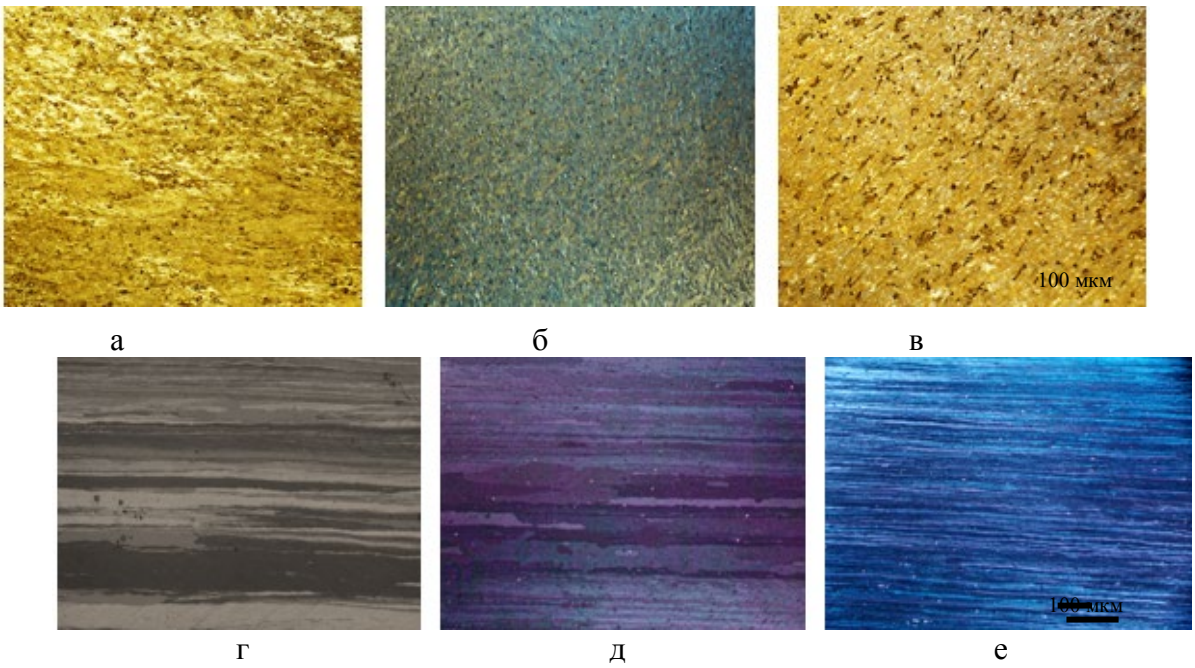


Рис. 1. Типичные микроструктуры образцов сплавов (а) на основе Al-Mn-Mg и (б,в) на основе Al-Mn-Cu после всесторонней ковки слитков при 300 °С или отжига слитков при 350 °С, 8 ч и последующей прокатки и 1 часа отжига при 450 °С

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда, грант № 23-19-00791-П.

Литература

1. K. Liu, X.G. Chen, Development of Al-Mn-Mg 3004 alloy for applications at elevated temperature via dispersoid strengthening, Mater. Des., 2015, 84, 340–350.
2. A.M.F. Muggerud, E.A. Mørtsell, Y. Li, R. Holmestad, Dispersoid strengthening in AA3xxx alloys with varying Mn and Si content during annealing at low temperatures, Mater. Sci. Eng. A., 2013, 567, 21–28.
3. P. Yang, O. Engler, H.-J. Klaar, Orientation relationship between Al 6 Mn precipitates and the Al matrix during continuous recrystallization in Al–1.3%Mn, J. Appl. Crystallogr., 1999, 321, 105–1118.
4. Y.J. Li, W.Z. Zhang, K. Marthinsen, Precipitation crystallography of plate-shaped Al6(Mn,Fe) dispersoids in AA5182 alloy, Acta Mater., 2012, 60, 5963–5974.
5. A.G. Mochugovskiy, N.Y. Tabachkova, A. V. Mikhaylovskaya, Nanodispersoids of the quasicrystalline I-phase in Mn- and Mg-bearing aluminum-based alloys, Mater. Lett., 2021, 284,128945.
6. A. Mochugovskiy, N. Tabachkova, A. Mikhaylovskaya, Annealing induced precipitation of nanoscale icosahedral quasicrystals in aluminum based alloy, Mater. Lett., 2019, 247, 200–203.
7. N. Rozman, J. Medved, F. Zupanič, Microstructural evolution in Al–Mn–Cu–(Be) alloys, Philos. Mag., 2011, 91, 4230–4246.
8. T. Bončina, M. Albu, F. Zupanič, Ageing of Al-Mn-Cu-Be Alloys for Stimulating Precipitation of Icosahedral Quasicrystals, Metals (Basel), 2020, 10937.
9. F. Zupanič, D. Wang, C. Gspan, T. Bončina, Precipitates in a quasicrystal-strengthened Al–Mn–Be–Cu alloy, Mater. Charact., 2015, 106, 93–99.
10. F. Zupanič, C. Gspan, J. Burja, T. Bončina, Quasicrystalline and L12 precipitates in a microalloyed Al-Mn-Cu alloy, Mater. Today Commun., 2020, 22100809.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ЖАРОПРОЧНОГО НИКЕЛЕВОГО СПЛАВА, ПОЛУЧЕННОГО ПЛАЗМЕННОЙ ПОРОШКОВОЙ НАПЛАВКОЙ, ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ВИДАХ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ.

И.А Мосягин, Т.В Ольшанская

Пермский национальный исследовательский политехнический университет
iluha_mos@mail.ru

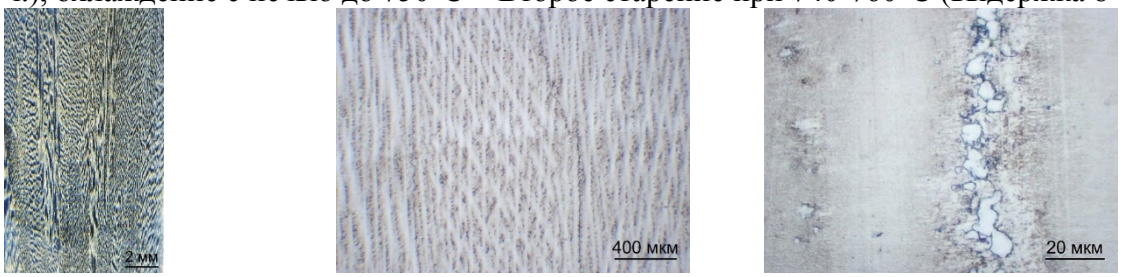
Известно, что технология получения ответственных деталей газотурбинных двигателей основывается на использовании горячего изостатического прессования (ГИП) и последующей термообработки. Горячее изостатическое прессование, как способ, сущность которого заключается во всесторонем сжатии заготовок газами при высоких температурах, позволяет избавиться от внутренних дефектов заготовок, таких как микропоры и микротрещины [1,2].

В работе исследовалось влияние горячего изостатического прессования и последующей термообработки на свойства и структуру жаропрочного никелевого сплава, полученного плазменно-порошковой наплавкой. А также произведет расчет предварительной термической обработки.

В качестве материала исследования использовались образцы в виде стенки размерами 140x90x20, полученные плазменной наплавкой из порошкового никелевого сплава. Наплавка производилась на токе прямой полярности, прямого действия. В процессе наплавки для защиты расплавленного металла и транспортировки порошка использовался аргон. Металлографическое исследование проводилось на шлифах, вырезанных из поперечного сечения.

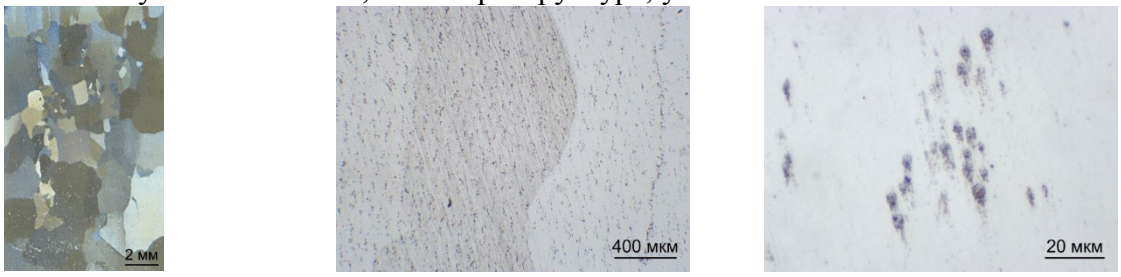
Исследование проводилось на трех образцах:

- Образец №1: без термической обработки
- Образец №2: ГИП при температуре 1100°С и давлении 120МПа
- Образец №3: ГИП при температуре 1100°С и давлении 120МПа + Закалка сжатым воздухом с 1200-1220°С (выдержка 4 ч.) + Первое старение при 900-920°С (выдержка 3 ч.), охлаждение с печью до 750°С + Второе старение при 740-760°С (выдержка 8 ч.).



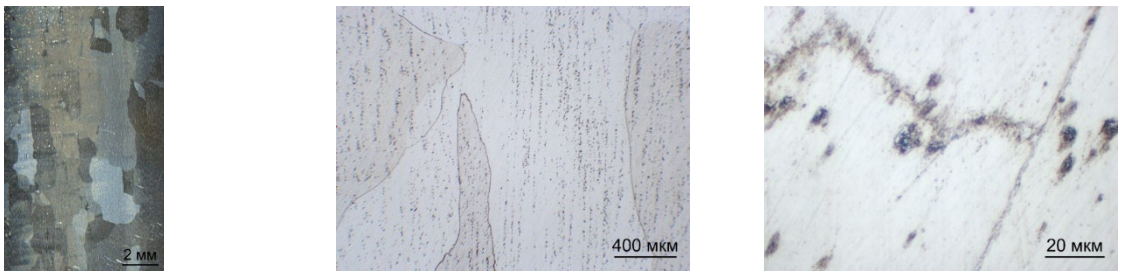
а б в

Рис. 1. Макро- и микроструктура образца №1: а – макроструктура, б – микроструктура, увеличение × 50, в – микроструктура, увеличение × 1000



а б в

Рис. 2. Макро- и микроструктура образца №2: а – макроструктура, б – микроструктура, увеличение × 50, в – микроструктура, увеличение × 1000



а б в

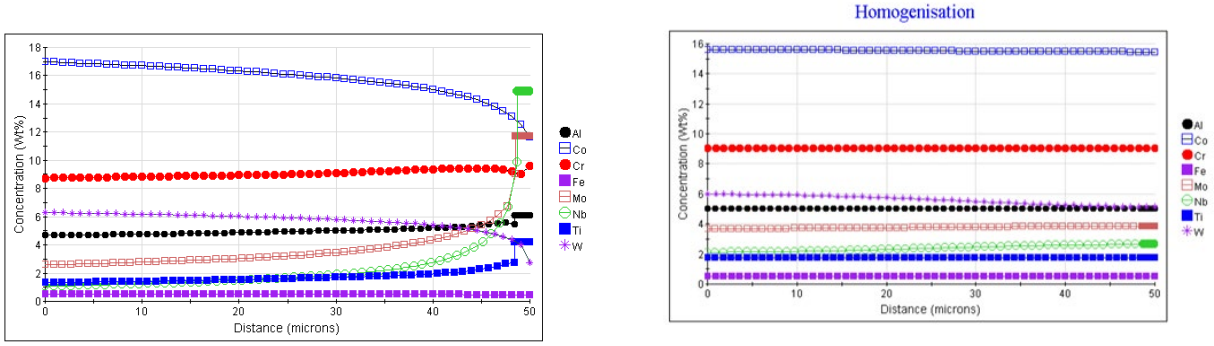
Рис. 3. Макро- и микроструктура образца №3: а – макроструктура, б – микроструктура, увеличение × 50, в – микроструктура, увеличение × 1000

Исходная структура металла представляет собой столбчатую структуру из длинных кристаллитов, вытянутых в вертикальном направлении. Микроструктура имеет ячеисто-дендритное строение, по границам зерен наблюдается образование мелкодисперсных фаз (Рис.1).

Проведение ГИП привело к изменению типа макроструктуры, а именно к образованию крупнозёрной неоднородной структуры. Самые крупные зерна имеют размер 6,1 мм. Анализ микроструктуры показал, что после ГИП остаются следы наследственной исходной структуры в виде мелкодисперсных включений по границам бывших дендритов, однако размер включений значительно уменьшился (Рис.2).

Проведение термической обработки после ГИП не приводит к значительному изменению макро- и микроструктуры. Макроструктура также имеет крупные не однородные по размеру зерна, в микроструктуре сохраняются мелкодисперсные интерметаллидные фазы по границам бывших дендритов. Различие между размерами включение после ГИП и ГИП+ТО незначительное (Рис.3).

Из вышеизложенного видно, что исходная структура заготовки, полученной аддитивным выращиванием, оказывает существенное влияние на формирование структуры при проведение термической обработки. Традиционные режимы ГИП и последующей термической обработки, не позволяют получить мелкозернистую структуру с равномерным выделением упрочняющих интерметаллидных соединений (упрочняющей γ’-фазы).



а б

Рис. 4. Расчет концентрации интерметаллидных фаз. а – исходное состояние, б – гомогенизация 1220 °С – 12 ч

Для получения мелкозернистой структуры с равномерным выделением упрочняющей γ’-фазы после ГИП+ТО в заготовках, получаемых по аддитивной технологии, необходимо проведение преддеформационной термической обработки для устранения исходной дендритной структуры и повышения однородности γ-раствора. Для получения данной структуры в качестве преддеформационой термической обработки может выступать гомогенизирующий отжиг. Из термодинамических расчетов количества образующихся фаз в равновесном состоянии было определено, что температура начала выделения γ’-фазы –

1195°С. Из расчетов концентрации интерметалидных фаз по ширине дендритов было определено, что оптимальные параметры гомогенизирующего отжига 1220°С – 12ч (Рис.4).

Исследования выполнены при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации и выполнения государственного задания «Разработка научно-технологических основ формирования системы материал-конструкция со специальными свойствами на основе гибридных аддитивных технологий»-FSNM-2024-0003.

Литература

1. С.В Агеев, В.Л. Гиршов. Горячее изостатическое прессование в порошковой металлургии. Металлообработка., 2015, 4(88) 56-60.

ОЦЕНКА КОЭФФИЦИЕНТА ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ КОМПОЗИТНОГО МАТЕРИАЛА МЕДЬ-ФУЛЛЕРЕН C_{60} МЕТОДОМ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Р.А. Миронов, Р.Т. Мурзаев

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
Murzaevrt@gmail.com

Наноматериалы и нанотехнологии – одно из ключевых направлений современного материаловедения. Их исследования находят применение практически во всех сферах человеческой деятельности. Необычные свойства наноматериалов обусловлены прежде всего квантовыми эффектами, увеличенной удельной поверхностью и способностью к самоорганизации.

Особого внимания заслуживают фуллерены – углеродные наночастицы диаметром около 0,7 нм. Благодаря своей уникальности они становятся эффективным инструментом для создания материалов нового поколения. В композитах на металлической основе фуллерены выполняют структурообразующую функцию, действуя на наноуровне. При этом геометрический размер внедрённых элементов выступает критическим параметром, который определяет эксплуатационные свойства всего материала.

Цель настоящей работы – исследовать влияние геометрических факторов (в частности, размера композита «медь – фуллерен») на его теплопроводные свойства. Такой композит перспективен для применения в системах терморегулирования, теплоотводящих элементах и термоинтерфейсах, функционирующих в широком диапазоне температур.

Для оценки коэффициента теплопроводности композита фуллерен (C_{60}) – медь использовали метод молекулярно‑динамического моделирования в интервале температур от 100 К до 1000 К. Исследование проводили в два этапа: сначала оценили коэффициент теплопроводности композита при различных плотностях фуллерена; затем проанализировали теплопроводность при неоднородном распределении фуллеренов – когда плотность частиц увеличивалась или уменьшалась вдоль направления распространения тепла. Это позволило оценить потенциал создания теплового диода.

Результаты показали, что теплопроводность композита «медь – фуллерен» возрастает при снижении плотности фуллеренов в структуре (при фиксированном количестве молекул C_{60}). Таким образом, фуллерен в металлической матрице препятствует распространению тепла и тем самым снижает общую теплопроводность композита.

Анализ коэффициента теплопроводности в композите с переменной плотностью фуллеренов выявил следующую закономерность: до температуры 400 К теплопроводность существенно зависит от направления теплового потока. Так, при движении тепла от области с более высокой плотностью фуллеренов к области с более низкой теплопроводность оказывается выше, а в обратном направлении – ниже. При температурах свыше 400 К значения коэффициентов теплопроводности в обоих направлениях становятся близкими друг к другу.

Полученные данные углубляют понимание теплофизических свойств медных композитов, модифицированных фуллеренами C_{60}. На их основе можно рекомендовать крупноразмерные структуры с низкой плотностью фуллеренов как перспективные материалы для систем терморегулирования, теплоотводящих элементов и термоинтерфейсов, рассчитанных на работу в широком температурном диапазоне.

ВЛИЯНИЕ ЭНЕРГИИ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ СВАРКИ НА ИЗМЕНЕНИЕ ПРОЧНОСТИ И СТРУКТУРЫ ОБРАЗЦОВ МЕДИ

М.А. Мурзинова, Э.Р. Шаяхметова, А.А. Назаров

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
mma@imsp.ru

В настоящей работе представлены результаты структурных исследований твердофазных соединений пластин меди, полученных ультразвуковой сваркой (УЗС) с энергиями от 125 до 1500 Дж под действием постоянного нормального давления 60 МПа.

Показано, что с увеличением энергии УЗС в указанном диапазоне длительность процесса возрастает от 0,2 до 1,9 с; температура в зоне сварного соединения повышается от комнатной до 560°С $(0{,}2–0{,}6)T_{пл}$; средняя величина сжимающей деформации в сварной точке увеличивается от 5 до 25%; средняя величина сдвиговой деформации, сосредоточенной в околошовной зоне толщиной 30 мкм, по приближенным оценкам увеличивается от 2400 до 36400, а ее максимальная скорость уменьшается от $8{,}4\times10^4$ $с^{-1}$ до $2{,}1\times10^4$ $с^{-1}$.

В переменном температурном поле под воздействием высокоскоростной знакопеременной сдвиговой деформации и неравномерно распределенной нормальной деформации в материале сварной точки протекают структурные изменения.

Показано, что во время УЗС с энергией 125 Дж, при которой максимальная температура в зоне соединения не превышает $0{,}3T_{пл}$, вблизи поверхностей контакта пластин меди формируется структура с размерами зерен/субзерен 0,7-1 мкм, что возможно благодаря развитию непрерывной динамической рекристаллизации. Увеличение энергии УЗС до 750-1500 Дж сопровождается ростом температуры в зоне соединения до $0{,}5T_{пл}$ и $0{,}6T_{пл}$, соответственно, что приводит к смене механизма динамической рекристаллизации на прерывистую. В зоне соединения уменьшается удельная площадь мало- и большеугловых границ, возрастает доля рекристаллизованного объема, но участки с мелкозернистой структурой, в которых размеры зерен/субзерен по-прежнему составляют 0,7-1 мкм присутствуют и после УЗС с энергией 1500 Дж. Параметры мелкозернистой структуры: распределение зерен по размерам, спектры разориентировок границ, средние внутризеренные разориентировки не меняются. Такая «стабильность» обеспечивается наличием большого количества мест для зарождения новых зерен в мелкозернистой структуре, сформировавшейся на ранних стадиях УЗС, и наличию цепочек микро-дефектов и пор, препятствующих миграции границ зерен. Структурные изменения в объемах пластин, на расстоянии 100-200 мкм от зоны соединения, обусловлены, главным образом нагревом и нормальными деформациями. Установлено, что в этих областях УЗС с энергией до 750 Дж сопровождается формированием субструктуры и нарушением регулярного строения границ двойников. Дальнейшее повышение энергии сварки приводит к развитию процессов возврата и росту зерен.

В исследованных условиях УЗС прочность соединений определялась не столько микроструктурой в зоне соединения, сколько его линейной плотностью. Максимальные значения прочности и линейной плотности сварных соединений были зафиксированы после УЗС с энергией 1000 Дж, когда температура в зоне соединения повышалась до 0,5Тпл, а средние сжимающие деформации в сварной точке составляли 15%. При больших энергиях происходило не только уменьшение толщины пластин, из-за внедрения зубцов инструмента, что вызывало концентрацию напряжений при испытаниях, но также снижалась линейная плотность соединений из-за образования усталостных микротрещин.

Исследование выполнено в рамках государственного задания ИПСМ РАН (регистрационный номер 124022900006-2). Часть экспериментальных данных получена при выполнении гранта РНФ 22-19-00617. Микроструктурные исследования проводились на базе ЦКП ИПСМ РАН "Структурные и физико-механические исследования материалов".

СТРУКТУРНЫЕ И ФАЗОВЫЕ ОСОБЕННОСТИ НАНОЧАСТИЦ ZrO_2, ПОЛУЧЕННЫЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ВЗРЫВОМ ПРОВОЛОКИ

А.М. Мурзакаев[1, 2]

[1]*Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург*
[2]*Институт естественных наук и математики Уральского федерального университета, Екатеринбург*
amurzak@mail.ru

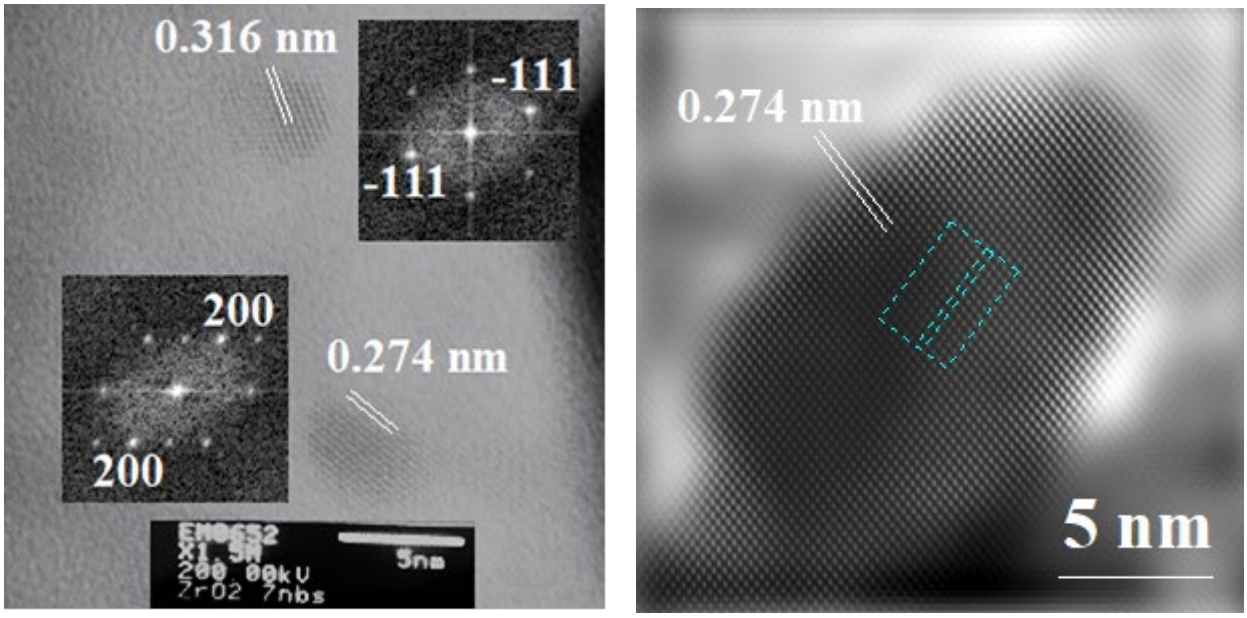
Диоксид циркония (ZrO_2) является одним из наиболее интенсивно изучаемых материалов из-за его технологически важных высокотемпературных применений. Ниже температуры плавления (2800 К) при атмосферном давлении ZrO_2 кристаллизуется в кубическую структуру (Fm3m), при температуре ниже 2640 К в тетрагональную структуру ($P4_2/nmc$) и ниже 1440 К в моноклинную структуру ($P2_1/c$) - бадделит. В диапазоне давлений 3–22 ГПа образуется орторомбическая структура O_I (Pbca), выше 22 ГПа орторомбическая структура O_{II} (Pnma), которая может сохраняться при комнатной температуре при декомпрессии. Две структуры O_{III} и O_{IV} образуются при давлениях ниже 50 ГПа и температуре 1200 К [1]. Введение трёх-, четырёхвалентных легирующих примесей в ZrO_2 может привести к образованию тетрагональной и кубической структуры при нормальных условиях.

Целью данной работы было исследование методом просвечивающей электронной микроскопией высокого разрешения (ПЭМВР) кристаллической структуры отдельных наночастиц (НЧ) ZrO_2 после электрического взрыва проволоки (ЭВП). РФА порошка ZrO_2 выявил только две модификации: моноклинный (56 %, ОКР 51 нм) и метастабильный тетрагональный (44 %, ОКР 30 нм) [2]. Дифракция электронов выделенной области (ДЭВО) подтвердила результаты РФА. Вводимая энергия при ЭВП может достичь энергии сублимации циркониевой проволоки. При ЭВП формирование НЧ происходит в экстремальных условиях (высокие температуры, высокие давления, высокие скорости процессов нагрева и охлаждения), что может привести к образованию неравновесной структуры в дисперсной фазе.

На рис. 1 представлены две НЧ. Межплоскостные расстояния каждой НЧ по всему поперечному сечению имеют одну и ту же величину. Верхняя НЧ имеет моноклинную кристаллическую структуру с межплоскостным расстоянием 0.316 нм (это расстояние есть в 28 JCPDS PDF файлах). Нижняя НЧ имеет орторомбическую кристаллическую структуру с межплоскостным расстоянием 0.274 нм. Эта величина межплоскостного расстояния принадлежит только орторомбической кристаллической структуре с d_{120}/ d_{200} JCPDS PDF 01-083-0810, s. G. Pnam, a = 0.547 nm, b = 0.634 nm, c = 0.324 nm.

Величина межплоскостного расстояния частицы № 1, полученная из быстрого преобразования Фурье (БПФ) (точки 1 и 2, вставка на рис. 2 а), составляет (0,315 ± 0,001) нм и соответствует моноклинной кристаллической структуре ZrO_2. Величина межплоскостного расстояния частицы № 2, полученная из БПФ (точки 3 и 4, вставка на рис. 1 а), составляет (0.298 ± 0,001) нм. Эта величина соответствует тетрагональной кристаллической структуре ZrO_2 (это расстояние есть в 2 JCPDS PDF файлах). У идеального кристалла расстояния между параллельными плоскостями кристаллической решётки, и соответственно на картинах ПЭМВР расстояния между отдельными полосами - слоями должны быть строго одинаковыми. Анализ ПЭМВР изображений показал, что практически все НЧ имеют дефектные структуры. У частицы № 1 межплоскостные расстояния, определённые по профилю интенсивности (верхний рис. 2 б), не совпадают со значением межплоскостного расстояния, определённым из БПФ. Расстояние между первым и вторым слоями d_1 = 0,284 нм. Расстояние между третьим и четвёртым слоями d_2 = 0,341 нм. Далее расстояния d_1 и d_2 между слоями изменяются случайным образом. Толщина десяти первых слоёв составляет

3,139 нм, среднее межплоскостное расстояние равно 0,3139 нм, для 30 слоёв - 0,315(3) нм. Из базы данных ZrO_2 следует, что d_1 = 0,284 нм соответствует моноклинной структуре ZrO_2 (это расстояние есть в 20 JCPDS PDF файлах). Межплоскостное расстояние d_2 = 0,341 нм в пределах погрешности определения может соответствовать ромбоэдрической структуре Zr_3O и графиту с d = 0,3400 нм. Межплоскостные расстояния, определённые по профилю интенсивности у частицы № 2 (нижняя картина на рис. 2 б), также не совпадают со значением межплоскостного расстояния, определённым по точкам 3 и 4 БПФ. Расстояние между первым и вторым, вторым и третьим слоями d_1 = 0,284 нм. Расстояние между третьим и четвертым слоями d_2 = 0,341 нм. Затем расстояния d_1 и d_2 между слоями изменяются случайным образом. Толщина первых десяти слоёв составляет 2,959 нм. Среднее межплоскостное расстояние равно 2,959 нм /10 = 0,2959 нм. Среднее межплоскостное расстояние для 30 слоёв - 8,876 нм /30 = 0,2958(6) нм. Межплоскостные расстояния d_1 и d_2 совпадают с результатами полученные для частицы №1. Получается, что комбинация межплоскостных расстояний d_1 и d_2 по формальным признакам может создавать разные кристаллические структуры.



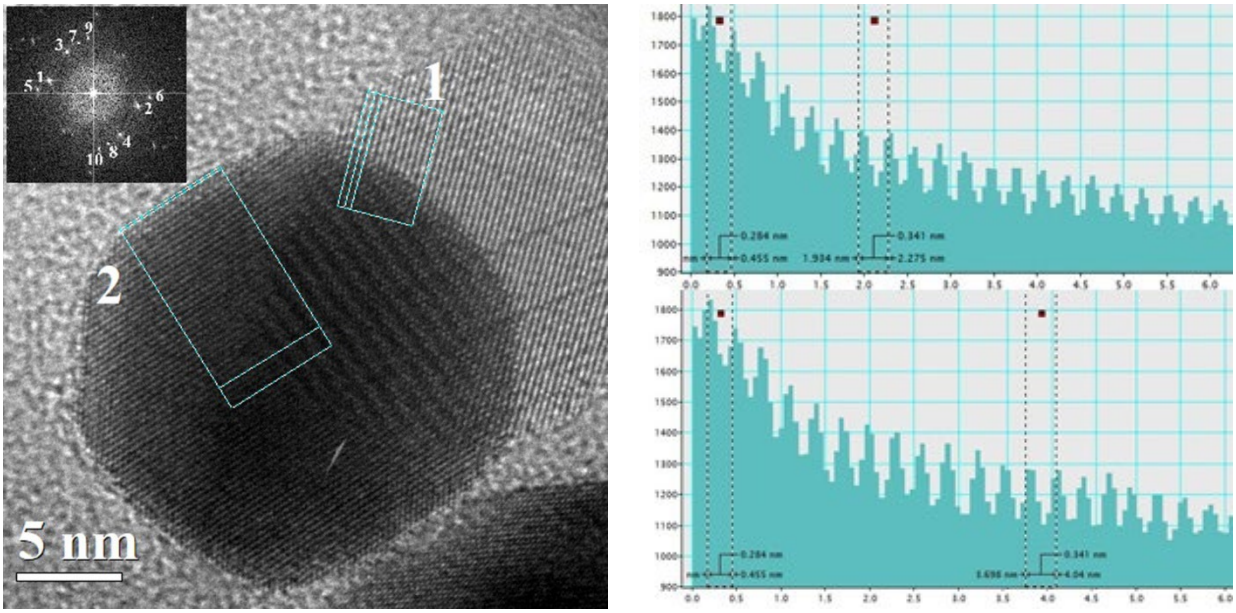
а б

Рис. 1 НЧ ZrO2 с моноклинной и орторомбической кристаллической структурой.

Более подробный анализ ПЭМВР картины частицы № 2 дал следующие результаты. В середине частицы из профиля интенсивности толщина десяти слоёв составляет 2,962 нм и среднее межплоскостное расстояние равно 0,2962 нм. Это межплоскостное расстояние соответствует только орторомбической кристаллической структуре (d_{111} JCPDS PDF 00-037-1413). Есть участок, где из профиля интенсивности толщина десяти слоёв составляет 2,844 нм и среднее межплоскостное расстояние равно 0,2844 нм. Это межплоскостное расстояние соответствует только моноклинной кристаллической структуре. Из профиля интенсивности среднее межплоскостное расстояние всей частицы равно 19,311 нм/66 = 0,29259 нм. Это межплоскостное расстояние может соответствовать кубической (d_{111} JCPDS PDF 00-007-0337) и орторомбической кристаллической структуре (d_{111} JCPDS PDF 00-034-1084).

Орторомбическая форма диоксида циркония ZrO_2 с бадделитоподобной структурой (часто описываемая в пространственных группах $Pbc2_1$ или $Pca2_1$) - это метастабильная фаза высокого давления или низкотемпературный продукт трансформации, сохраняющий характерное для природного моноклинного бадделеита семи координационное окружение циркония. Возникает как стабильная фаза при сжатии обычных модификаций диоксида циркония, наблюдается при охлаждении частично стабилизированного оксида циркония до

температур около 30 К и может образоваться в нанокристаллах и плёнках. В [3] было показано, что после ионного облучения НЧ ZrO_2 с метастабильной тетрагональной кристаллической структурой могут состоять из орторомбических наноразмерных доменов.



а б

Рис. 2. НЧ ZrO_2 с моноклинной (1) и тетрагональной (2) кристаллической структурами (а); профиль интенсивности частицы 1 верхний, профиль интенсивности частицы 2 нижний (б).

Гетерогенный беспорядок НЧ ZrO_2 может быть связан с сосуществованием различных локальных атомных окружений, поверхностных дефектов и фазовых состояний в объёме одной малой частицы. Из-за высокого вклада поверхностной энергии решётка нестабилизированного ZrO_2 искажается, что приводит к распределению длин связей и координационных чисел. Проявления гетерогенности выражается в многофазности: одновременное присутствие доменов моноклинной, тетрагональной, кубической и орторомбической фаз в пределах одной наночастицы. Орторомбическая форма диоксида циркония ZrO_2 с бадделитоподобной структурой (часто описываемая в пространственных группах вроде $Pbc2_1$ или $Pca2_1$) - это метастабильная фаза высокого давления или низкотемпературный продукт трансформации, сохраняющий характерное для природного моноклинного бадделеита семи координационное окружение циркония [4].

Литература

1. O.A. Graeve, Zirconia. In: J.F. Shackelford, R.H. Doremus, (eds) Ceramic and Glass Materials. Structure, Properties and Processing, Springer New York, NY, 2008,.169-197.
2. A.V. Bagazeev, Yu.A. Kotov, A.I. Medvedev, E.I. Azarkevich, T.M. Demina, A.M. Murzakaev, O.R. Timoshenkova, Nanotechnologies Russ. 2010, 5(9–10) 656–664.
3. A. P. Solomon, E. C. O'Quinn, J. Liu, I. M. Gussev, X. Guo, J. Neuefeind, C. Trautmann, R. C. Ewing, G. Baldinozzi, M. K. Lang, Atomic-scale structure of ZrO2: Formation of metastable polymorphs. Science Advances, 2025, 11 (1)
4. https://next-gen.materialsproject.org/materials/mp-1190186

ФОРМИРОВАНИЕ БИМОДАЛЬНОЙ МИКРОСТРУКТУРЫ В СПЛАВАХ СИСТЕМЫ Ni-Mn-Ga

И.И. Мусабиров[1], И.М. Сафаров[1], Р.М. Галеев[1], Р.Ю. Гайфуллин[1], К.К. Кирилюк[1], В.С. Калашников[2], А.В. Несоленов[2], В.В. Коледов[2], С.В. Таскаев[3], А.Б. Гаджиев[4], А.М. Алиев[4], Р.Р. Мулюков[1]

[1]*Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа*
[2]*Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва*
[3]*Челябинский государственный университет, Челябинск*
[4]*Институт физики им. Х.И. Амирханова РАН, Махачкала*
irekmusabirov@mail.ru

Сплавы Гейслера демонстрируют такие функциональные эффекты как магнитоуправляемая память формы, магнитокалорический эффект, эластокалорический эффект и др. Величины эффектов достаточны для потенциального практического применения на практике. Однако на сегодня применение в практических устройствах промышленного производства не реализовано из-за высокой термоциклической хрупкости этих материалов в литом состоянии. Трансформация литой структуры в мелкозернистою, ультрамелкозернистую или нанокристаллическую повышает термостабильность материала, но при этом снижаются величины функциональных эффектов. Распространенным способом снижения термоциклической хрупкости является формирование двухфазной структуры, в которой крупные зерна матричной фазы несут функциональную нагрузку, а вторичная фаза служит стоком микронапряжений, формирующихся в результате инициируемого внешним воздействием мартенситного превращения.

Авторами работы разработан способ повышения механических свойств сплавов Гейслера системы Ni-Mn-Ga с помощью формирования бимодальной структуры, в которой исходные равноосные зерна окружены прослойкой мелкозернистой структуры. При этом в целом структура сплава остается однофазной. Подготовлена серия сплавов с составом близким к стехиометрическому соединению Ni_2MnGa, которые были легированы Si. Сплав хорошо изучен с точки зрения литого состояния и является хорошим модельным объектом. Однако в сплавах Ni_2MnGa с крупнозернистой структурой процесс динамической рекристаллизации при горячей деформации протекает крайне медленно из-за высокой подвижности дислокаций, что препятствует получению даже частично рекристаллизованной бимодальной структуры. Для ускорения этого процесса представляет интерес дополнительное легирование сплавов Ni_2MnGa кремнием, способствующим уменьшению подвижности дислокаций и более быстрому их накоплению.

В ходе выполнения работы показано, что в сплавах Гейслера Ni_2MnGa трансформация крупнозернистой структуры в бимодальную типа «ожерелье» приводит к кратному снижению термоциклической хрупкости, при сохранении чувствительности температуры мартенситного превращения к внешнему магнитному полю. При этом не происходит существенное изменение величины магнитокалорического эффекта. Разработанный метод получения в сплавах Ni_2MnGa бимодальной структуры, обеспечивающий существенное увеличение ресурса работы, позволит использовать эти сплавы в качестве активного элемента твердотельного термодинамического устройства – холодильника или теплового насоса. Разработанный подход к преодолению термоциклической хрупкости и повышению функциональных свойств сплавов Гейслера, основанного на управлении структурой, может быть применим к другим таким сплавам даже более хрупким, но с бóльшими величинами функциональных эффектов.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИПСМ РАН.

ПЛОТНОСТЬ СШИВКИ СИЛИКОНОВ И ПАРАМЕТРЫ ГИПЕРУПРУГИХ МОДЕЛЕЙ

С.А. Муслов[1], С.А. Плаксин[2], В.В. Шадрин[3], П.Ю. Сухочев[4], В.А. Платунова[2]

[1]*Российский университет медицины, Москва*
[2]*Пермский государственный медицинский университет им. акад. Е.А. Вагнера, Пермь*
[3]*Институт механики сплошных сред УрО РАН, Пермь*
[4]*МГУ имени М. В. Ломоносова, Москва*
muslov@mail.ru

Плотность сшивки (cross-linked density) это число точек сшивки (узлов полимерной сетки) в единице объёма. Обычно её выражают в моль/м³. Она напрямую определяет топологию сетки: чем больше сшивок, тем жёстче материал, тем сильнее он сопротивляется деформации. Сшивка макромолекул резко меняет параметры физических свойств полимеров поскольку реакция сшивания приводят к увеличению степени их полимеризации. Чем больше степень сшивания и число поперечных связей между цепочками полимеров, тем выше механические свойства последних [1].

Существует много способов измерения плотности сшивки: метод равновесного набухания, ЯМР-и ИК-спектроскопия, дифференциальная сканирующая калориметрия (ДСК) и другие [2]. Часто в исследованиях комбинируют несколько подходов – это повышает достоверность результата. В рамках гиперупругой модели её косвенно оценивают через материальные константы. Можно использовать 2-параметрическую модель Муни-Ривлина [3], одну из самых простых и надежных в семействе гиперупругих моделей [4]. В ней есть константы (C_{10}), которые как раз отражают плотность сшивки сетки ν:

$$\nu = \frac{C_{10}}{RT}, \qquad (1)$$

где R = 8.31 Дж/моль·К– универсальная газовая постоянная, Т – температура. Аналогичная по содержанию формула для перекрестно-сшитых полимеров дана в [5]. Формула (1) тем точнее, чем очевиднее неравенство $C_{10} >> C_{01}$ в модели Муни-Ривлина.

Как известно, силиконы – это кремнийорганические полимеры (полиорганосилоксаны). В [6] в исследовании гиперупругих свойств силиконов оболочек для грудных протезов “Eurosilicone” при их долговременном использовании (0-19 лет) и деградации было установлено скоррелированное размягчение параметров C_{10} в модели Муни-Ривлина, Е (линейной модели), С (модели Фанга) и μ (неогуковской) (рис. 1). Другие параметры моделей (рассматривали феноменологические гиперупругие модели вида неогуковской, Муни-Ривлина, Огдена, полиномиальной, Йео, Веронда-Вестманн, Фанга, а также формально определенные линейную и экспоненциальную модели) продемонстрировали силу связи с данной группой постоянных умеренную или слабую и далее не анализировались. В корреляционную матрицу они включены не были (табл. 1).

Таблица 1. Корреляционная матрица переменных C_{10}, μ, С, Е

	C_{10}	μ	С	Е
C_{10}	1			
μ	0.955031	1		
С	0.916236	0.982001	1	
Е	0.977193	0.991974	0.979781	1

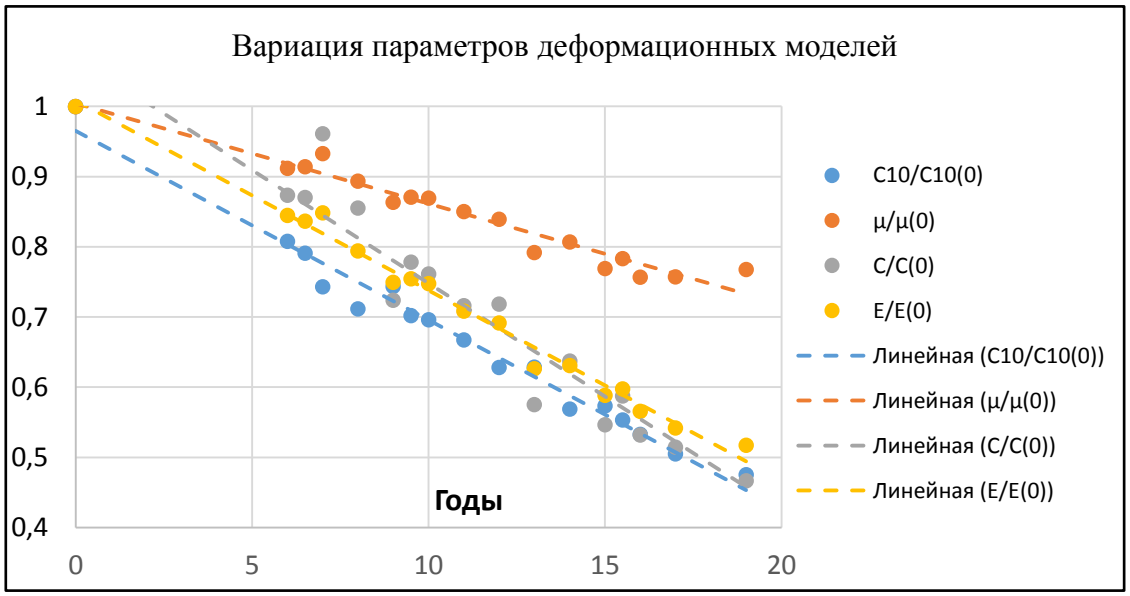


Рис. 1. Размягчение параметров деформационных моделей: $C_{10}/C_{10}(0)$, $\mu/\mu(0)$, $C/C(0)$ и $E/E(0)$ в зависимости от времени эксплуатации (в относительных единицах).

В итоге вследствие обнаруженного феномена открылись новые возможности для оценки динамики изменения плотности сшивки данных силиконов путем измерения параметров моделей (не только Муни-Ривлина).

Так в рамках модели аффинной сети (**affine network model**) плотность сшивки полимеров, в которых точки сшивки могут скользить вдоль полимерных цепей (slide-ring polymer networks), пропорциональна аффинному модулю Юнга E_{affine} согласно предсказываемому теорией соотношению

$$E_{affine} = 3\nu k_B T \sim \nu \quad (2)$$

где ν – число плотности сшитых нитей сети, k_B – постоянная Больцмана, равная $1.38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К [7].

В [8] была исследована корреляция плотности сшивки с модулем упругости геля со скользящими поперечными связями и предложена уточненная формула

$$E = 3\nu k_B T/(3 + \eta)^2 \sim \nu, \quad (3)$$

учитывающая степень скольжения поперечных связей в сшивках η. Но, тем не менее, обсуждается и возможность более слабой зависимости модуля от плотности поперечных связей, обусловленной энтропийным фактором

$$E \sim \nu^{0.5}. \quad (4)$$

В нашем случае, согласно формуле (1), плотность сшивки “Eurosilicone” за 19 лет, прошедших после установки маммопротезов, должна уменьшиться при T = 298 K с 251.79 до 119.67 моль/м^3, т.е. на 52.48% (табл. 2).

Таблица 2. Вычисление плотности сшивки полимерного материала “Eurosilicone”

Время эксплуатации, лет	Модель, параметр	Параметр, %	Плотность сшивки ν, %
0	Все	100	100
19	Муни-Ривлина, C_{10}	47.52	47.52
	Неогуковская, μ	76.78	≈ 75
	Фанга, C	46.68	≈ 50
	Линейная, E	51.73	≈ 50

Аналогичный прогноз относительно величины ν может быть сделан на основании того, что коэффициент корреляции между изменениями E и C равен 0.98 (табл. 1). В

результате плотность сшивки согласно формулам (2) и (3) для модуля Юнга E подлежит снижению примерно на 50%. Несколько выпадает из данного тренда неогуковская модель, единственная постоянная которой μ уменьшается всего на 23.22% (табл. 2) при коэффициенте корреляции E и μ 0.99 (табл. 1). Т.е. применение неогуковской модели дает заниженные значения Δν.

Таким образом, ассоциировано с ухудшением по мере эксплуатации функциональных свойств оболочек силиконовых имплантов (падением значений максимального относительного удлинения до разрыва и сроков службы) [9] одновременно наблюдается согласованное размягчение материальных постоянных гиперупругих моделей.

Отметим, что полученным результатам способствовало “родство” рассмотренных параметров гиперупругих моделей: в недеформированном состоянии и при малых деформациях модуль сдвига G_0 равен в модели Муни-Ривлина $2(C_{10} + C_{01})$, неогуковской 2μ, Фанга C, линейной E/3 (для эластомеров).

Выводы

1. За время эксплуатации протезов динамика изменения параметров деформационных моделей коррелирует с уменьшением плотности сшивки силиконов.
2. Скоррелированное размягчение параметров моделей неогуковской μ, Фанга C и линейной E позволяет использовать их для оценки динамики изменения плотности сшивки силиконов оболочек грудных протезов наравне с константой C_{10} модели Муни-Ривлина.
3. Критерий допустимого снижения уровня параметров гиперупругих моделей материала, который бы позволил оценить безопасный срок использования имплантов без значимой деградации их свойств пока не установлен и может стать предметом дальнейших исследований.

Литература

1. А. А. Леонович Физика и химия полимеров. СПб.: Лань, 2023. – 605 с.
2. В. А. Липин, Т. Е. Горкина, Теоретические и экспериментальные методы исследования в химии полимеров: учеб. Пособие / В. А. Липин, Т. Е. Горкина. — СПб.: ВШТЭ СПбГУПТД, 2021. – 69 с.
3. Nomesh Kumar, W. Rao. Hyperelastic Mooney-Rivlin model: determination and physical interpretation of material constants. MIT Int. J. Mech. Eng., 2016, 6(1) 43-46.
4. С.А. Муслов, С.Д. Арутюнов, И.В. Маев [и др.]. Гиперупругие свойства биологических тканей : монография Под ред. С.С. Перцова, С.В. Панина. – М.: Практическая медицина, 2025. 232 с.
5. И.А. Седов, А.Р. Абдуллин, Способ определения степени сшивки при исследовании перекрестно-сшитых поликапролактонов. Номер патента: RU 2718130 C1 Номер заявки: 2019135026. Дата регистрации: 31.10.2019. Дата публикации: 30.03.2020.
6. S.A. Muslov, S.V. Panin, P.Y. Sukhochev, V.V. Shadrin, S.A. Plaksin et al. Changes in the hyperelastic properties of silicone breast implants during their use in human bodies. Mechanics of Composite Materials. In print.
7. K. Mayumi, C. Liu, Y. Yasuda, K. Ito, Softness, Elasticity, and Toughness of Polymer Networks with Slide-Ring Cross-Links. Gels, 2021, 7 91. https://doi.org/10.3390/gels7030091.
8. Kazuaki Kato, Yuta Ikeda, Kohzo Ito. Direct Determination of Cross-Link Density and Its Correlation with the Elastic Modulus of a Gel with Slidable Cross-Links. ACS Macro Lett., 2019, 8 700−704.
9. S.A. Plaksin, D.N. Ponomarev, V.V. Shadrin, I.A. Osorgina Changes in mechanical properties of breast implants depending on the time they remain in the body. Theses of the XII National Congress named after N.O. Milanov “Plastic surgery, aesthetic medicine and cosmetology”. 2023. 74–75.

ВЛИЯНИЕ ВАКУУМНОГО ОТЖИГА НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА СВАРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ИЗ ТИТАНОВОГО СПЛАВА ВТ6

М.Х. Мухаметрахимов[1], Р.Я. Лутфуллин[1, 2]

[1]*Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа*

[2]*Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа*

msia@mail.ru

Метод сварка давлением титановых сплавов при пониженных температурах не гарантирует отсутствия в зоне твердофазного соединения (ТФС) остаточных напряжений и структурных неоднородностей, включая наличие микропор. Традиционно считается, что микропоры в зоне ТФС являются дефектами, снижающими показатели конструкционной прочности.

Одним из технологических методов обработки сварных соединений для стабилизации структуры и свойств является вакуумный отжиг. Вакуумный отжиг применяется для снятия остаточных напряжений, снижения концентрации водорода, стабилизации структуры и повышения пластичности, вязкости соединений. Главными параметрами вакуумного отжига являются температура нагрева, время выдержки и глубина вакуума.

В этой связи проводили исследования микроструктуры и механических свойств сварных соединений из сплава ВТ6 после сварки давлением при пониженных температурах и последующего вакуумного отжига при различных температурах и длительности выдержки.

Для титанового сплава ВТ6 вакуумный отжиг проводили при температуре 750 °С. Эта температура находится ниже температуры рекристаллизации сплава (850 °С), что предотвращает огрубление структуры и снижение прочностных свойств.

Материалом для исследования был широко используемый в авиакосмическом машиностроении двухфазный титановый сплав ВТ6 стандартного химического состава по ГОСТ 19807 – 91.

Исходные заготовки сплава имели мелкозернистую структуру (МЗС) со средним размером зерен 3 - 5 мкм и ультрамелкозернистую структуру (УМЗС) со средним размером зерен около 0,5 мкм [1,2].

Для исследований были изготовлены пакеты из листовых заготовок титанового сплава ВТ6 при температуре 750 °С с МЗС и УМЗС: 1) двухслойные заготовки, состоящие из МЗС и МЗС, обозначали как МЗС/МЗС и 2) состоящие из УМЗС и УМЗС – УМЗС/УМЗС.

Сварку давлением осуществляли в вакуумной печи СНВЭ–1,3.1/16–ИЗ-УХЛЧ.1 при температуре 750 °С в течение 120 мин. приложением газообразного аргона давлением 3 МПа через гибкую мембрану с последующим вакуумным отжигом при различных температурах и с различным временем выдержки. Глубину вакуума в процессе эксперимента поддерживали не хуже 2×10^{-3} Па.

Металлографические исследования и прицельные съемки зоны ТФС проводили с помощью растрового (сканирующего) электронного микроскопа – «TESCAN MIRA3 LMU». Качество сварного соединения оценивали по относительной протяженности пор в зоне ТФС в поперечном сечении [3].

Испытания на сдвиг проводили при комнатной температуре со скоростью деформирования 1 мм/мин на универсальном динамометре фирмы «INSTRON–1185» по методике подробно представленной в [4]. Согласно этой методике, для испытаний на сдвиг из двухслойных пакетов, сваренных между собой, вырезали специальные образцы таким образом, чтобы условная линия ТФС располагалась в средней части образца параллельно оси растяжения при толщине листовых заготовок 3 мм, ширина нахлёста в образцах составляла примерно 0,5 мм.

Для изучения влияния диффузионных процессов на поведение микропор в зоне ТФС были проведены исследования на образцах, вырезанных из сварных соединений МЗС/МЗС и

УМЗС/УМЗС и подвергнутых вакуумному отжигу при температуре 750 °С после различной по длительности выдержки, составляющей 60 и 300 минут, а также при температуре 900 °С – после выдержки в течение 60 минут.

На рис. 1 представлена микроструктура зон ТФС сплава ВТ6 в различных структурных состояниях (МЗС/МЗС и УМЗС/УМЗС).

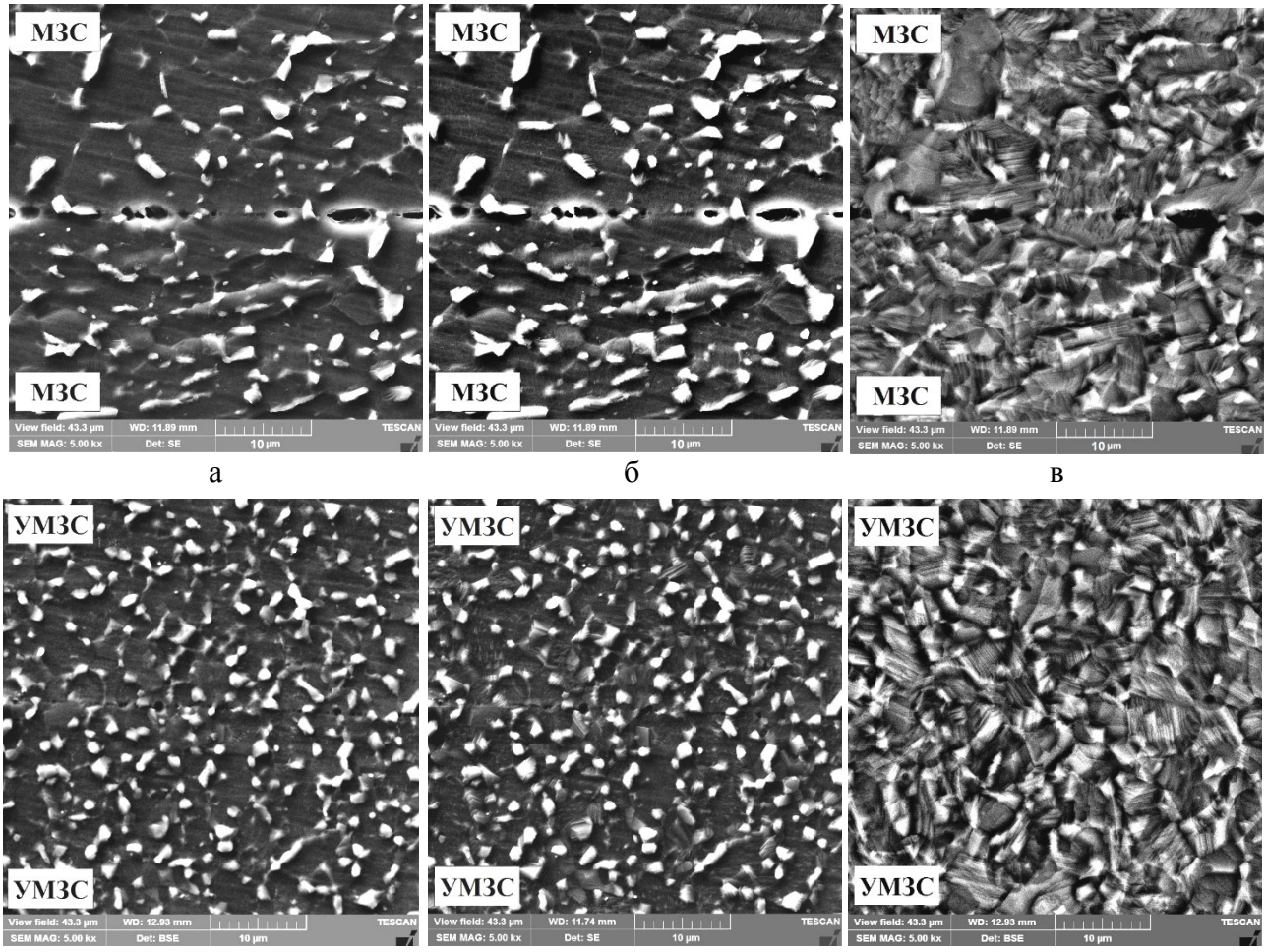


Рис. 1. Прицельная съемка микроструктуры в зоне ТФС образцов из сплава ВТ6 после вакуумного отжига при Т = 750 °С и времени выдержки 60 и 300 минут (*а, б* и *г, д*) и после вакуумного отжига при Т = 900 °С в течение 60 минут (*в, е*)

Металлографический анализ зоны ТФС образцов позволил выявить закономерности микроструктурных изменений, характер распределения микропор и их общую протяженность. В зоне соединения образцов из МЗС дефекты имеют форму узких и длинных несплощностей, ориентированных вдоль первоначальной плоскости контакта (рис. 1, *а, б, г*). Как показал прицельный эксперимент по наблюдению за поведением микропор, вакуумный отжиг при температуре 750 °С в течение 300 минут практически не изменил размер и количество исходных микропор в зоне ТФС.

С уменьшением среднего размера зерен в сплаве ВТ6 в зоне ТФС форма микропор становится преимущественно сферической, уменьшается их размер, относительная протяженность микропор снижается (рис. 1, *г, д, е*). Вероятно, такие изменения определяются именно активными диффузионными процессами, характерными для сплава ВТ6 с УМЗС.

Как видно из рис.1, *в* и *е,* вакуумный отжиг при температуре 900 °С и времени выдержки в течение 60 минут приводит к снижению относительная протяженность

микропор, сопровождающееся интенсивным ростом зерен. Повышение температуры отжига до 900 °С действует несравненно эффективнее, чем увеличение времени вакуумного отжига при температуре 750 °С.

Механические испытания на сдвиг показали, что с увеличением времени вакуумного отжига при температуре 750 °С от 60 до 300 минут прочностные характеристики сварных образцов снижаются, но механические свойства остаются высокими, чем при температуре 900 °С (таблица 1).

Таблица 1. Результаты механических испытаний образцов на сдвиг после сварки давлением при температуре 750 °С и последующего вакуумного отжига

Состояние	T°C	750 °C			900 °C	
	$t_{выдер.}$, мин.	0	60	300	0	60
УМЗС/УМЗС	$\tau_{сдвиг.}$, МПа	598,6	578,7	556,2	598,6	428,9
МЗС/МЗС		540,5	468,4	443,7	540,5	416,7

Таким образом, экспериментально показано, что вакуумный отжиг при температуре 750 °С практически не влияет на снижение пористости в зоне ТФС за исключением исчезновения очень мелких пор, которые существенно меньше, чем размер зерен сплава ВТ6. После повышения температуры вакуумного отжига до 900 °С в течение 60 минут в зоне ТФС остаются только единичные поры, однако при этом наблюдается заметное снижение прочности сварных образцов из-за интенсивного роста зерен.

Финансирование работы. Работа выполнена в рамках государственного задания ИПСМ РАН, НИОКТР № 124022900007–9.

Литература

1. R.R. Mulyukov, A.A. Nazarov, R.M. Imayev. Current achievements on superplasticity and related phenomena at the Institute for Metals Superplasticity Problems. Lett. Mater., 2018, 8(4s) 510-516.
2. Р.Р. Мулюков, Р.М. Имаев, А.А. Назаров и др. Сверхпластичность ультрамелкозернистых сплавов: Эксперимент, теория, технологии. М.: Наука, 2014. 284 с.
3. С.А. Салтыков. Стереометрическая металлография. М.: Металлургия, 1976. 72 с.
4. М.Х. Мухаметрахимов. Твердофазная свариваемость листов титанового сплава ВТ6 при пониженной температуре. Письма о материалах, 2015, 5 194–197.

ГОРЯЧАЯ ДЕФОРМАЦИЯ ГРАНУЛИРУЕМЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ: МИКРОСТРУКТУРА И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Ш.Х. Мухтаров, Р.И. Зайнуллин, Р.В. Шахов, А.А. Ганеев, В.М. Имаев

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа, Россия
shamilm@imsp.ru

Жаропрочные никелевые сплавы, применяемые для изготовления деталей ротора газотурбинных двигателей (ГТД) должны выдерживать экстремальные механические напряжения и температурные градиенты. Микроструктра таких сплавов обычно состоит из γ матрицы, карбидов, дисперсных выделений γ′ ($Ni_3(Al,Ti,Nb,Ta)$) фазы со сверхструктурой типа $L1_2$. Высокую макрооднородность объемных заготовок сплава обычно обеспечивают процессы порошковой металлургии. После термической обработки (ТО) в сплавах обычно встречаются остаточные первичные карбиды МС на основе Ti, вторичные M_6C на основе Mo, Cr и W, и $M_{23}C_6$ на основе Cr. В основном детали из гранулируемых никелевых сплавов изготавливают горячим изостатическим прессованием (ГИП) гранул в капсулах, близких по форме к детали, с ее последующей ТО. Повышения механических свойств ГИП сплавов добиваются усложнением химического состава тугоплавкими элементами. Для использования в перспективных ГТД требуются сплавы, с механическими свойствами, превышающими достигнутые по технологии ГИП+ТО. Повышение механических свойств достигается введением деформации ГИП сплава [1]. Исследования ГИП сплава ВВ751П после отжига при 1150°С показало, что размер зерен не изменился, в структуре присутствовали вторичные карбиды M_6C и $M_{23}C_6$ на основе Nb по границам зерен, а M_6C и в γ зернах. Горячая изотермическая или квазиизотермическая деформация ГИП сплавов ВВ751П, ВВ750П и СМДЖС1П [2] привела к формированию мелкозернистой структуры в основном за счет прерывистой динамической рекристаллизации (ДР), как у сплавов с низкой энергией дефекта упаковки. ДР сплава проходила однородно в случае коалесценции γ′ фазы при медленном охлаждении с температуры отжига. Увеличение расстояния между центрами частиц γ′ фазы при деформации привело к увеличению длины свободного пробега дислокаций. Присутствие извилистых границ зерен также оказала положительное влияние на развитие ДР. На примере сплавов ВВ751П и СМДЖС1П показано, что введение деформационной обработки повысило механические свойства за счет меньшего размера зерен - 8-18 мкм, по сравнению с зернами около 30 мкм в ГИП сплавах, и отсутствия наследственных границ гранул. На основании выполненных работ показано, что измельченная структура может быть получена в отожженных ГИП заготовках с медленным охлаждением, горячей деформации при температуре ниже сольвуса с последующей обработкой на твердый раствор в двухфазной области с охлаждением на воздухе и старением. По разработанным режимам из сплавов ВВ751П и СМДЖС-1П были изготовлены качественные штамповки с размерами до ∅ 400 мм × 100 мм. Исследование показало, что использование горячей деформации повышает механические свойства ГИП сплавов, приведены сравнения механических свойств с другими известными сплавами.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-29-00806, https://rscf.ru/project/25-29-00806/

Литература

1. R.I. Zainullin, S.K. Mukhtarov, A.A. Ganeev, R.V. Shakhov, V.M. Imayev. Effect of hot forging on formation of a fine-grained structure and mechanical properties of a powder metallurgy nickel base superalloy. Lett. Mater., 2023, 13(4s) 414-419.
2. Sh.Kh. Mukhtarov, D.A. Karyagin, A.V. Logunov, A.A. Ganeev, R.I. Zainullin, R.V. Shakhov, V.M. Imayev. Effect of hot working on the microstructure and tensile properties of a novel PM Re-bearing nickel base superalloy. Lett. Mater. 2022, 12(4s) 457-462.

МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА Fe-Cr-Mn-Ni-Mo-Cu-N СТАЛЕЙ, ПОЛУЧЕННЫХ ЭЛЕКТРОДУГОВЫМ ВЫРАЩИВАНИЕМ ИЗ РАЗРАБОТАННЫХ ПОРОШКОВЫХ ПРОВОЛОК

А.Н. Мушников[1], А.В. Березовский[1, 2], В.Е. Веселова[1], Н.Н. Соболева[1]

[1]*Институт машиноведения имени Э.С. Горкунова Уральского отделения Российской академии наук, Екатеринбург*
[2]*Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург*
mushnikov@imach.uran.ru

Разработка новых присадочных материалов для аддитивных технологий, обеспечивающих повышенные механические свойства изделий, является актуальной задачей. Ранее были разработаны и изготовлены 14 опытных составов порошковых проволок для электродугового выращивания, позволяющие наплавить металл, содержащий в химическом составе 0,25–0,37 мас. % азота, пониженное содержание никеля (по сравнению с наиболее популярными аустенитными присадочными материалами), и обеспечивающими аустенитную или аустенитно-ферритную структуру. Комплекс характеристик сталей, полученных при наплавке некоторыми из этих проволок, представлен в [1, 2]. Настоящая работа посвящена анализу механических свойств всех разработанных материалов для поиска связи этих свойств с химическим составом и структурно-фазовыми характеристиками, с целью определения возможностей разработки новых материалов с повышенными эксплуатационными характеристиками.

Из всех опытных порошковых проволок методом электродугового выращивания были изготовлены изделия типа «стенка», из которых затем вырезали образцы для механических испытаний. Экспериментально определены условный предел текучести, временное сопротивление и относительное удлинение образцов при комнатной температуре и пониженных температурах до -50 ºС.

Выполнено моделирования механических свойств в JMatPro. Ошибка расчета для некоторых составов превышает 20%. В качестве альтернативного метода на комплексе экспериментальных данных была построена модель машинного обучения (алгоритм градиентного бустинга). Процедура кросс-валидации выявила, что коэффициент детерминации составляет менее 0,8. Низкое качество аппроксимации может быть обусловлено многофакторным характером зависимостей и нехваткой экспериментальных точек. Однако созданная модель позволила определить химические элементы, вносящие наибольший вклад в каждую из характеристик для материалов данной системы легирования. Построенные расчетные зависимости механических свойств от химического состава сталей позволяют определить дальнейшее направление экспериментальных исследований.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-19-20059 (https://rscf.ru/project/24-19-20059/) и Правительства Свердловской области. В экспериментах было использовано оборудование ЦКП «Пластометрия» ИМАШ УрО РАН.

Литература

1 N.N. Soboleva, A.N. Mushnikov, V.E. Veselova, E.B. Votinova, E.A. Merkushkin, M.S. Smolentsev, A.V. Berezovskiy, M.V. Lapin, A.M. Kuznetsov, A.S. Smolentsev. Characteristics of stainless steel deposited by the WAAM using the developed flux-cored wire. The International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 2025, 140, 1553–1563.

2 Н.Н. Соболева, А.М. Кузнецов, А.Н. Мушников, В.Е. Веселова, А.С. Смоленцев. Механические свойства азотсодержащей аустенитной стали, полученной электродуговой многослойной наплавкой из порошковой проволоки. Frontier Materials & Technologies, 2026, 1, 83-95.

НЕЙТРОННО-ПОГЛОЩАЮЩИЙ СПЛАВ НА ОСНОВЕ НИКЕЛЯ: ПОЛУЧЕНИЕ, СТРУКТУРА, СВОЙСТВА

Т.И. Назарова, О.Р. Валиахметов, Р.М. Имаев, Р.Р. Мулюков

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
nazarova.ti@mail.ru

Разработка инновационных нейтронно-поглощающих сплавов является одной из приоритетных задач современной ядерной энергетики [1]. Решение данной задачи позволит существенно повысить безопасность ядерных установок и расширить возможности защиты оборудования и персонала от радиационного воздействия.

Новые нейтронно-поглощающие материалы должны одновременно обладать высокой эффективностью захвата нейтронов и высокими характеристиками эксплуатационных свойств. В частности, необходимо обеспечить высокие показатели прочности, устойчивости к радиационному разрушению и коррозионной стойкости при длительных сроках эксплуатации.

Высокими механическими свойствами и значительной коррозионной стойкостью обладают никелевые сплавы, что делает их перспективными кандидатами для использования в качестве основы при разработке новых нейтронно-поглощающих сплавов. Для достижения необходимого сочетания механических, коррозионных и радиационных свойств используют, прежде всего, легирование основы сплава. Так, для обеспечения прочности, жаропрочности и коррозионной стойкости, целесообразно введение в состав вольфрама и хрома. Для обеспечения нейтронно-поглощающей способности сплава перспективно введение редкоземельного элемента, гадолиния [2].

Однако легирование отмеченными элементами усложняет технологический процесс получения литого материала высокого качества. Так, в работе [3] отмечена сложность достижения высокой химической однородности по всему объёму слитков, полученных вакуумно-индукционной плавкой или вакуумно-дуговым переплавом. В результате чего, в таких материалах становится затруднительным формирование однородной структуры и проведение последующей деформационно-термической обработки.

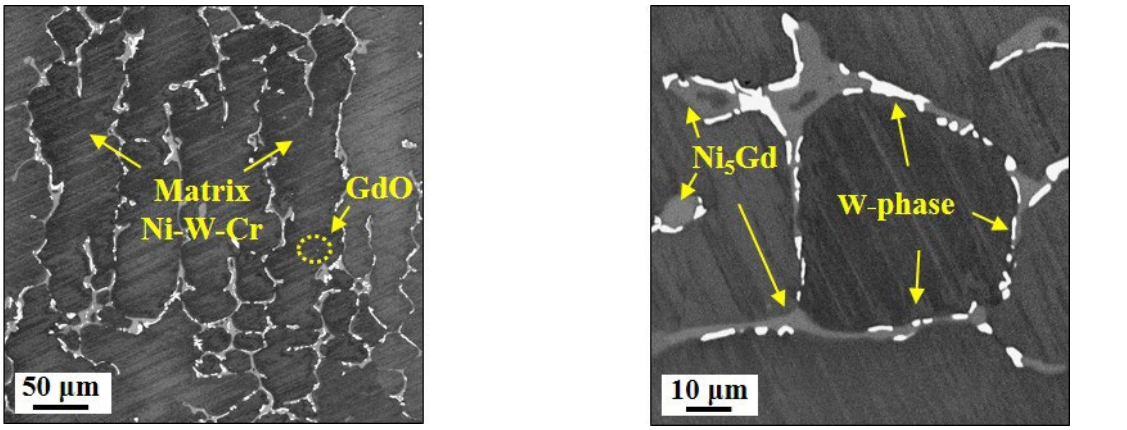
Целью данной работы являлась отработка технологических режимов выплавки слитка нейтронно-поглощающего сплава на основе никеля, легированного вольфрамом, хромом и гадолинием и подготовка регламентированной структуры для последующей деформационно-термической обработки.

Нейтронно-поглощающий сплав химического состава Ni-42(W, Cr, Gd) мас.% был изготовлен на лабораторной установке аргонно-дуговой плавки [4, 5]. Выплавка слитка осуществлялась с использованием многостадийной схемы плавки, исключая одновременную завалку всех компонентов [3]. Для достижения высокой однородности по химическому составу, переплав слитка осуществлялся многократно [4, 6]. В результате был получен слиток сплава высокого качества – предельно однородный по химическому составу и точно соответствующий расчётным значениям. Литейных дефектов (пор, газовых раковин, избыточных оксидных включений) в материале обнаружено не было.

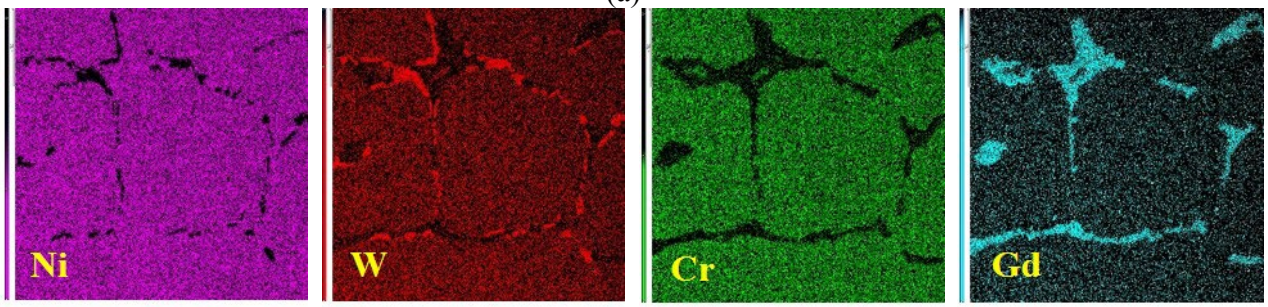
Структура сплава в исходном состоянии представляет собой матрицу системы Ni(W,Cr) с равномерно распределёнными в ней прослойками интерметаллидной фазы Ni_5Gd и единичными оксидными частицами GdO. Наличие в сплаве фазы Ni_5Gd согласуется с фазовой диаграммой Ni-Gd [7].

Термическая обработка сплава, включающая в себя гомогенизационный отжиг при температуре около 1200 ℃, с последующим охлаждением слитка до комнатной температуры с определённой скоростью, способствовала выделению частиц тугоплавкой фазы на основе вольфрама (W-фазы), равномерно распределённых по объёму никелевой матрицы (рис. 1).

Частицы W-фазы преимущественно локализуются в теле прослоек Ni_5Gd фазы и на межфазных границах Ni_5Gd/ Ni(W,Cr). Размер частиц составил в основном от 0,5 до 5,0 мкм.



(а)



(б)

Рис. 1. Микроструктура нейтронно-поглощающего сплава Ni-42(W, Cr, Gd) мас.%: (а) после литья и гомогенизационного отжига при 1200 °С; (б) карта распределения химических элементов сплава

Поскольку нейтронно-поглощающий сплав на основе никеля предполагается использовать в виде листового материала (в частности, для изготовления защитных экранов, контейнеров и т.д.), требовалось оценить возможность его прокатки. Для этого заготовка подвергалась прокатке на двухвалковом стане с общей степенью деформации по высоте около 80 %, в интервале температур 900 - 1000 °С. Указанный интервал температур является на 150-250 °С ниже интервала температур, используемого в известных технологических схемах прокатки нейтронно-поглощающих сплавов на никелевой основе. После прокатки и термической обработки в материале и на боковых его поверхностях дефектов (трещин) обнаружено не было. Вероятно, равномерному распределению нагрузки при деформации, и, как следствие, отсутствию возможности зарождения трещин, способствовало наличие однородного распределения частиц тугоплавкой W-фазы в никелевой матрице сплава после гомогенизационного отжига.

После прокатки и термической обработки структура сплава имеет строчечный вид, с равномерно распределёнными в Ni(W,Cr) матрице прослойками Ni_5Gd фазы и частицами W-фазы. Анализ фазового состава показал, что он полностью соответствует фазовому составу сплава после гомогенизационного отжига.

Оценка микротвёрдости сплава (рис. 2) показала, что в исходном состоянии и после гомогенизационного отжига значения микротвёрдости находятся примерно на одном уровне и составляют ≈ 300 HV. Последующая прокатка и термическая обработка обеспечивают повышение микротвёрдости сплава на 64 %, по сравнению с её значением после гомогенизационного отжига.

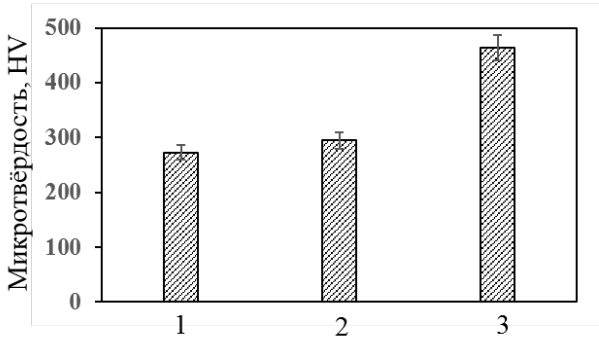


Рис. 2. Микротвёрдость нейтронно-поглощающего сплава Ni-42(W, Cr, Gd): (1) исходное состояние; (2) после литья и гомогенизационного отжига при 1200 °C; (3) после литья, гомогенизационного отжига при 1200 °C и прокатки при 900 - 1000 °C

Таким образом, в данной работе был получен слиток нейтронно-поглощающего сплава Ni-42(W, Cr, Gd) мас.% высокого качества. В результате применения гомогенизационного отжига, последующей прокатки и термической обработки из слитка сплава был получен листовой полуфабрикат. Полученный материал отличается высокой степенью однородности структуры и обладает достаточно высоким уровнем микротвёрдости.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИПСМ РАН. Работа выполнена на базе ЦКП ИПСМ РАН «Структурные и физико-механические исследования материалов».

Литература

1. G.S.M. Ahmed. Neutron shielding: advanced mechanisms, challenges, and material strategies. Radiat. Phys. Chem., 2026, 241 113544.
2. G. Xu, L.T. Jiang, Q. Zhang, J. Qiao, D. Gong, G.H. Wu. The design of a novel neutron shielding B4C/Al composite containing Gd. Mater. Des., 2016, 111 375-381.
3. Е.В. Шильников, И.В. Кабанов, А.В. Муруева, С.Л. Урин, А.И. Ильинский, Ю.А. Троянова, О.Г. Нефедова. Способ получения полуфабрикатов из жаропрочного сплава Х25Н45В30. Пат. РФ 2719051 С1, МПК C22F 1/10, 2020, 11 11.
4. T.I. Nazarova, K.S. Nazarov, S.N. Sergeev, V.M. Imayev, R.M. Imayev. Microstructure and mechanical properties of intermetallic g-TiAl alloy alloyed with dysprosium. Lett. Mater., 2017, 9 (4s) 307-311.
5. Р.А. Гайсин, В.М. Имаев, Р.М. Имаев Микроструктура и механические свойства композита ВТ25У/TiB, полученного in situ с помощью литья и подвергнутого горячей ковке. Lett. Mater., 2017, 7 (2) 186-192.
6. Д.Е. Каблов, П.В. Панин, А.А. Ширяев, Н.А. Ночовная. Опыт использования вакуумно-дуговой печи ALD VAR L200 для выплавки слитков жаропрочных сплавов на основе алюминида титана. АМИТ, 2014, 2 27-33.
7. Z. Rahou, K. Mahdouk. Thermodynamic reassessment of Gd-Ni system. J. Alloys Compd. 2015, 648 346-352.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПЕНОАЛЮМИНИЯ ПРИ ОДНООСНОЙ ДЕФОРМАЦИИ

А.С. Нарсеев, П.В. Захаров, С.В. Ганин

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург
narseev_as@mail.ru

Введение. Пеноалюминий — перспективный конструкционный материал, сочетающий низкую плотность, высокую удельную прочность, эффективное поглощение энергии удара и хорошие теплофизические свойства. Его механические характеристики во многом определяются параметрами пористой структуры: размерами, формой, распределением и объемной долей пор. Экспериментальное исследование процессов порообразования и деформирования вблизи отдельных пор затруднено из-за их атомного масштаба, поэтому эффективным инструментом является молекулярно-динамическое моделирование, позволяющее изучать эволюцию структуры, локализацию напряжений и механизмы разрушения. В данной работе процесс порообразования моделируется с учетом выделения газа при разложении гидрида титана. Используется модель представительного объема алюминия с одиночной сферической порой в центре расчетной области, что исключает влияние взаимодействия нескольких пор и позволяет исследовать локальное напряженно-деформированное состояние. Цель работы — разработка молекулярно-динамической модели алюминия с одиночной сферической порой и исследование особенностей его деформирования при одноосном растяжении и сжатии.

Моделирование. Молекулярно-динамическое моделирование выполнялось с использованием пакета LAMMPS. Расчетная модель представляла собой монокристалл алюминия с ГЦК-решеткой размером 162 × 162 × 162 Å и содержала около 256 тыс. атомов. Рассматривались два варианта граничных условий: периодические по всем трем направлениям для моделирования объемного материала и периодические только по оси растяжения (Z) со свободными границами по остальным направлениям для моделирования волокон и стержней из пеноалюминия. Межатомное взаимодействие описывалось потенциалом Embedded Atom Method (EAM), обеспечивающим корректное воспроизведение структурных и механических свойств алюминия и эффективное выполнение параллельных вычислений на графических ускорителях. Шаг интегрирования составлял 0,001 пс.

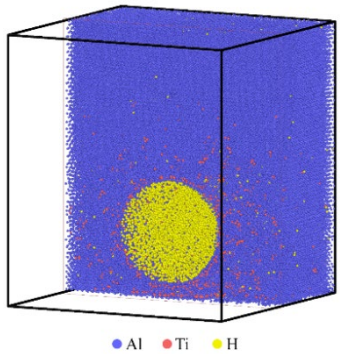


Рис. 1. Визуализация модели в разрезе, созданная при помощи OVITO

Пора формировалась путем моделирования разложения гидрида титана в алюминиевом расплаве. В центральной части модели размещались атомы титана, между которыми постепенно вводились атомы водорода в соответствии с экспериментальной кинетикой разложения гидрида титана. По мере накопления водорода образовывалась газовая полость, вытеснявшая окружающие атомы алюминия и формировавшая одиночную пору вблизи центра расчетной ячейки. После завершения процесса система релаксировалась

и охлаждалась до комнатной температуры. Полученная атомная конфигурация с одиночной порой использовалась для моделирования одноосного растяжения и сжатия.

Методика механических испытаний. После формирования поры и релаксации исследовалось механическое поведение образца при одноосном растяжении и сжатии. Перед нагружением структура минимизировалась методом сопряженных градиентов, затем релаксировалась при 300 К в ансамбле NPT в течение 20 000 шагов. Испытания проводились при 300 К в ансамбле NVT, а нагружение вдоль оси Z осуществлялось изменением длины расчетной области: увеличением при растяжении и уменьшением при сжатии. Для оценки влияния скорости деформации расчеты выполнялись при нескольких скоростях нагружения за счет изменения числа шагов моделирования при одинаковой конечной деформации. В процессе моделирования рассчитывались атомные напряжения по вириальному выражению (команда stress/atom), а макроскопическое напряжение определялось суммированием атомных напряжений с последующим делением на текущий объем. Инженерная деформация вычислялась по формуле

$$\varepsilon = \frac{\mathrm{L} - L_0}{L_0},$$

где ε — инженерная деформация; L_0 — начальная длина образца (или расчетной области) вдоль направления нагружения; L — текущая длина образца.

Дополнительно регистрировались потенциальная и кинетическая энергия, температура, давление, плотность и параметр центральной симметрии (CSP), позволяющий выявлять дефекты кристаллической структуры и развитие пластической деформации. Полученные данные использовались для построения диаграмм «напряжение–деформация» и анализа механизмов деформирования при растяжении и сжатии.

Результаты и обсуждение. На рисунке 2 представлена эволюция поры при одноосном растяжении и сжатии. На начальном этапе деформирования форма поры практически не изменяется, однако вблизи ее поверхности наблюдается концентрация напряжений, приводящая к зарождению пластической деформации.

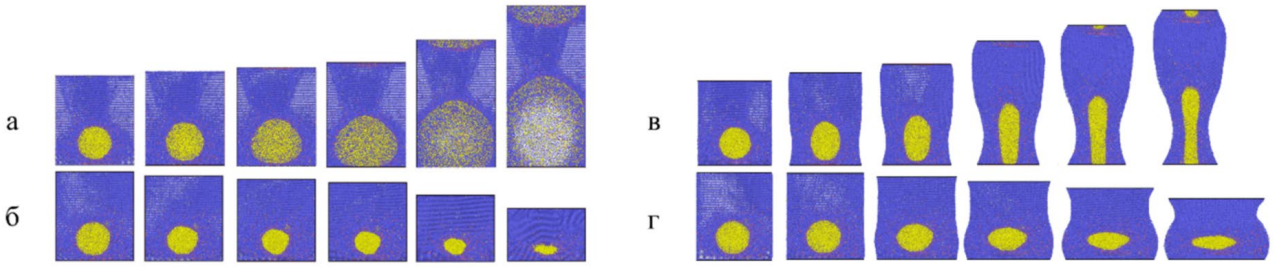
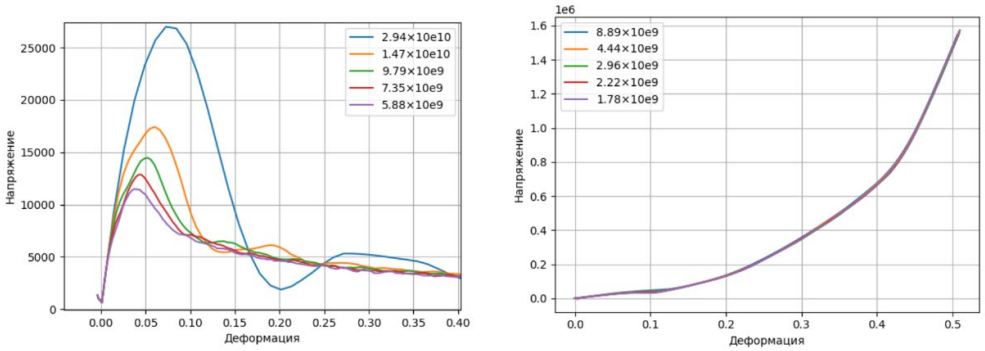


Рис. 2. Изображения модели с периодическими граничными условиями при растяжении (а) и при сжатии (б), со свободными граничными условиями по осям x и y при растяжении (в) и сжатии (г)

При растяжении пора увеличивается и вытягивается вдоль направления нагрузки. При этом ее форма изменяется по-разному для периодических (рис. 2(а), 2(б)) и свободных (рис. 2(в), 2(г)) граничных условий. Пластическая деформация локализуется у поверхности поры, где высокие напряжения снижают энергетический барьер для зарождения частичных и полных дислокаций. Их движение по плотноупакованным плоскостям ГЦК-алюминия вызывает сдвиговую деформацию, рост поры вдоль оси Z и образование шейки при свободных граничных условиях [2,3]. В случае периодических граничных условий пора стремится занять весь объем, возникающий при деформации. При сжатии объем поры уменьшается, происходит ее частичное схлопывание за счет смещения окружающих атомов. Пластическая деформация распределяется более равномерно, локализация повреждений выражена слабее, а часть водорода выходит из поры в междоузлия кристаллической решетки и области скопления дислокаций.



а б

Рис. 3. Кривые зависимости напряжении от деформации для модели при различных скоростях деформации при растяжении (а) и при сжатии (б) с периодическими граничными условиями.

Выводы. Эволюция поры определяет развитие пластической деформации и механическое поведение алюминия при различных видах нагружения. На рисунке 3 представлены диаграммы «напряжение–деформация» при одноосном растяжении и сжатии, а также рассчитаны основные механические характеристики: предел текучести, предел прочности и нагрузка разрушения. При растяжении максимальные напряжения локализуются на поверхности поры, вызывая ее рост и последующее разрушение материала. Рассматриваемые скорости деформирования соответствуют ударно-волновому нагружению, при котором скорость деформации превышает скорость релаксации напряжений за счет движения дислокаций. Это приводит к одновременному зарождению большого числа дислокаций, экспоненциальному росту дефектов и появлению выраженного пика прочности (рис. 3а). При сжатии происходит перераспределение напряжений, постепенное схлопывание поры и развитие пластической деформации в окружающем материале. Полученные результаты подтверждают существенное влияние поры на напряженно-деформированное состояние и механические свойства алюминия.

Литература

1. R.R. Mulyukov, A.A. Nazarov, R.M. Imayev. Current achievements on superplasticity and related phenomena at the Institute for Metals Superplasticity Problems. Lett. Mater., 2018, 8(4s) 510-516.
2. В.В. Рыбин. Большие пластические деформации и разрушение металлов. М.: Металлургия, 1986. 224 с.
3. С. Ю. Кондратьев. Механические свойства металлов : учебное пособие. Санкт-Петербург : Изд-во Политехн. ун-та, 2011. 1 электрон. опт. диск. DOI 10.18720/SPBPU/2/si20-629

МИКРОНАПРЯЖЕНИЯ И УСТАЛОСТНАЯ ДОЛГОВЕЧНОСТЬ СУБ- И МИКРОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ТИТАНА: ДВОЙСТВЕННАЯ РОЛЬ ДЕФЕКТНОЙ СТРУКТУРЫ

М.В. Нарыкова[1], В.И. Бетехтин[1], Ю.Р. Колобов[2], С.С. Манохин[2], А.Ю. Токмачева-Колобова[2], А.Г. Кадомцев[1], О.В. Амосова[1]

[1] *Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург*
[2] *ФИЦ Проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка*
Maria.Narykova@mail.ioffe.ru

Технически чистый титан ВТ1-0 широко применяется в авиакосмической и медицинской промышленности благодаря высокой коррозионной стойкости, биосовместимости и благоприятному соотношению прочности и плотности. Формирование субмикрокристаллической (СМК) структуры методами интенсивной пластической деформации (ИПД) повышает статическую прочность, однако влияние такой обработки на усталостную долговечность остаётся дискуссионным [1]. Предполагается, что ключевую роль играют внутренние микронапряжения, возникающие при ИПД, но прямых экспериментальных доказательств этой связи до сих пор было недостаточно.

В работе проведено сравнительное исследование титана ВТ1-0 в двух структурных состояниях: СМК (средний размер зерна ~200 нм, получен механико-термической обработкой [2]) и рекристаллизованном микрокристаллическом (МК, ~1.5–2 мкм, отжиг при 550°C). Усталостные испытания проводились на установке Instron Electropulse E3000 по схеме «нагружение – релаксация» по синусоидальному закону. Использованы методы РЭМ, ПЭМ, рентгеноструктурного анализа (РСА, метод Вильямсона-Холла [3]), измерения микротвердости и прецизионной плотности. Настоящая работа продолжает цикл исследований авторов, посвящённых усталостному разрушению титана ВТ1-0 в суб- и микрокристаллическом состояниях [4, 5].

СМК-состояние характеризуется не только ультрамелким зерном, но и значительно более высоким уровнем микронапряжений. По данным РСА, величина микронапряжений в исходном СМК-титане (до испытаний) составляет $\varepsilon = 0.21\pm0.02\%$, тогда как в МК-титане – $0.15\pm0.02\%$. Эти микронапряжения являются следствием высокой плотности дислокаций и наличия неравновесных большеугловых границ, сформированных при ИПД. Измерения микротвердости подтверждают это различие: исходная микротвердость СМК-титана (≈270 Hv) примерно на 30% выше, чем МК-титана (≈190 Hv), что качественно согласуется с соотношением Холла-Петча и дополнительным дислокационным упрочнением (рис. 1).

В процессе циклического нагружения были исследованы образцы после различного числа циклов: $2\cdot10^5$, $4\cdot10^5$, $6\cdot10^5$, $8\cdot10^5$ и 10^6 (часть образцов доведена до разрушения). Установлено, что Для МК-состояния микротвердость остаётся практически неизменной во всём диапазоне нагружения вплоть до разрушения. Распределение микротвердости вдоль рабочей части демонстрирует локальное повышение в центральной части образца (при большом числе циклов N). Это указывает на то, что в МК материале пластическая деформация и накопление повреждений концентрируются в ограниченной области максимальных внешних напряжений.

Совершенно иная картина наблюдается для СМК-титана. Во-первых, средняя микротвердость монотонно снижается с ростом числа циклов, достигая примерно 250 Hv к моменту разрушения (снижение на ~8% от исходной). Во-вторых, распределение микротвердости по длине образца оказывается равномерным: снижение фиксируется не только в центральной части, но и на значительном удалении от геометрического центра образца. Таким образом, в СМК-материале накопление усталостных повреждений носит объёмный характер.

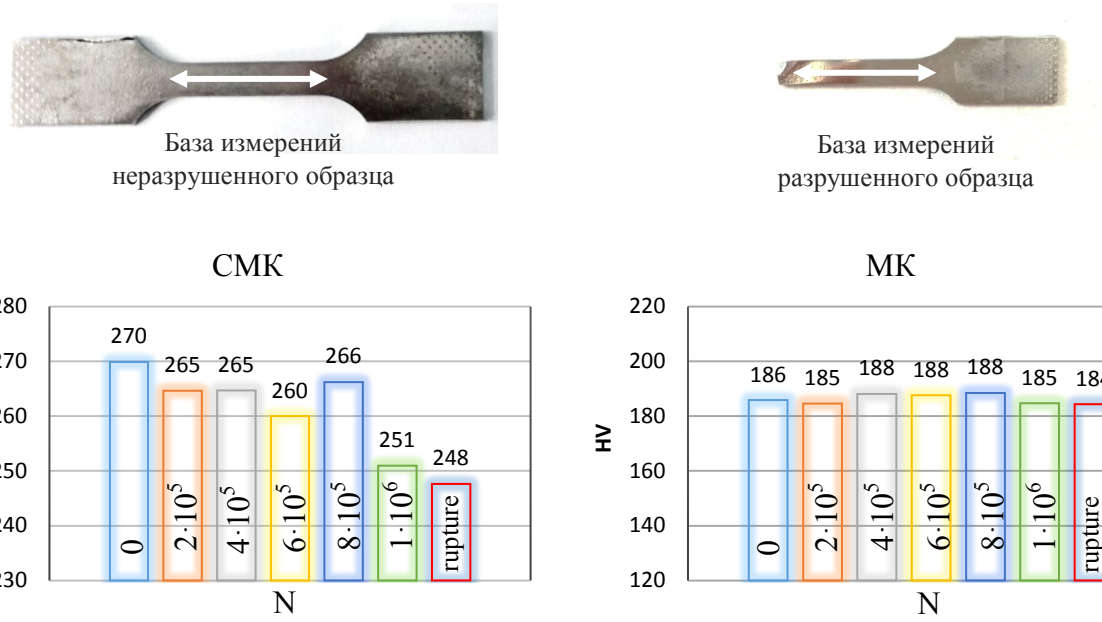


Рис. 1. Микротвердость для СМК и МК титана ВТ1-0 после усталостных испытаний, в том числе с доведением до разрушения.

Проведенные ПЭМ исследования выявили в МК лишь отдельные изгибные контуры и повышенную плотность дислокаций при сохранении равновесной структуры. В СМК, напротив, формируются протяжённые полосовые дислокационные структуры с клиновидными границами, ориентированные под углом ~45° к оси нагружения. Такие полосы рассматриваются как зародыши усталостных трещин.

Рентгеноструктурный анализ показал, что после циклических испытаний микронапряжения в СМК возрастают до 0.36±0.02% и распределяются равномерно по длине образца. В МК рост напряжений до 0.22±0.02% носит локальный характер. Дополнительным параметром, характеризующим накопление дефектов, служит относительное изменение плотности $\Delta\rho/\rho$, измеренное на испытанных образцах. Для СМК-титана зависимость $\Delta\rho/\rho$ от числа циклов N близка к линейной, что характерно для процессов, где повреждения накапливаются равномерно по объёму. Для МК-титана зависимость имеет нелинейный (экспоненциальный) характер, что соответствует локализованному накоплению повреждений с последующим ростом трещины.

На основании полученных данных предложены два механизма разрушения. Для МК-титана – классический локализованный: деформация концентрируется в отдельных крупных зёрнах, накопление дислокаций приводит к локальному росту напряжений и зарождению трещины. Для СМК-титана: высокая исходная плотность дефектов и закрепление дислокаций на границах препятствуют релаксации; упругая энергия накапливается во всём объёме и при достижении критического уровня вызывает формирование полос локализации – готовых каналов для роста трещины, минуя границы зёрен. Этому способствует также исходная нанопористость в СМК структуре (объёмная доля ~$4\cdot10^{-4}$), сформированная при ИПД, Подробно методика и результаты изучения нанопористости СМК ВТ1-0 методами малоуглового рентгеновского рассеяния и денситометрии приведены в [4].

Таким образом, установлена корреляция между исходным уровнем микронапряжений, их эволюцией при циклической усталости и механизмами усталостного разрушения. Показано, что в СМК-титане микронапряжения играют двойственную роль: они обеспечивают высокую статическую прочность, но при высокоцикловой усталости выступают как внутренний источник повреждений, приводя к объёмному накоплению дефектов и формированию полосовых структур – зародышей трещин. Полученные

результаты необходимо учитывать при проектировании ответственных конструкций из ультрамелкозернистого титана, работающих в условиях длительных циклических нагрузок.

Литература

1. S. Hosseini, M. Farajollahi, M. Ebrahimi. Residual stress, fatigue behavior, and mechanical properties of equal-channel angular pressed commercial pure titanium. Journal of Materials Research and Technolog, 2024, 28, 3297-3305.
2. Ю.Р. Колобов. Рос. нанотехнологии 4, 2009, 11−12, 69.
3. W.H. Hall. Proc. Phys. Soc. London A 62, 1949, 359A, 741.
4. М.В. Нарыкова, В.И. Бетехтин, А.Г. Кадомцев, Ю.Р. Колобов. Исследование усталостного разрушения суб- и микрокристаллического титана ВТ1-0 после его обработки высоким гидростатическим давлением. ФТТ, 2024, 66 (12), 2317-2320.
5. М.В. Нарыкова, С.С. Манохин, В.И. Бетехтин, Ю.Р. Колобов, А.Г. Кадомцев, О.В. Амосова. Микроструктурные изменения и механизмы разрушения в титане ВТ1-0 в суб- и микрокристаллическом состояниях после обработки высоким давлением и усталостных испытаний. ФТТ, 2025, 67 (5), 781-789.

СИНТЕЗ НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКИХ НАНОКАРБИДОВ ВОЛЬФРАМА И МОЛИБДЕНА В ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ПЛАЗМЕ ДУГОВОГО РАЗРЯДА

А. Насырбаев, Д.С. Никитин, И.И. Шаненков, Ю.Л. Шаненкова

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск
arn1@tpu.ru

Переход к экологически чистой энергетике невозможен без разработки эффективных методов получения молекулярного водорода, обладающего высокой энергетической ценностью. Ключевую роль в технологии электролиза воды играет реакция выделения водорода, эффективность которой напрямую зависит от применяемых электрокатализаторов. Несмотря на то, что металлы платиновой группы демонстрируют наивысшую активность в электрокатализе, их широкое применение сдерживается высокой стоимостью и низкой стабильностью в циклических режимах. В связи с этим актуальной задачей является поиск альтернативных материалов, среди которых особое место занимают карбиды переходных металлов VI группы (W, Mo). Эти соединения обладают схожим с благородными металлами кристаллическим строением и рассматриваются как перспективная замена Pt [1]. Однако существующие катализаторы на основе гексагональных фаз WC/W_2C и MoC/Mo_2C все еще не удовлетворяют требованиям промышленности по активности и долговечности.

Одним из путей повышения эффективности является наноструктурирование, обеспечивающее рост площади поверхности и улучшение переноса заряда. Другим эффективным подходом является переход от стабильных гексагональных фаз к метастабильным кубическим модификациям γ-WC_{1-x} и α-MoC_{1-x}. Согласно теоретическим расчетам, кубические полиморфы обладают значительно более высокой плотностью электронных состояний на уровне Ферми, что предопределяет их улучшенные каталитические свойства [2,3]. Главным препятствием для их практического применения является термодинамическая нестабильность данных фаз при нормальных условиях. Стабилизация таких структур в нанокристаллическом состоянии возможна только при сверхвысоких скоростях охлаждения расплава (не менее 10^8–10^{11} К/с) [4]. Преодоление этих ограничений требует применения неравновесных, динамических методов синтеза, таких как электровзрывные и плазмохимические технологии. В работе рассматривается плазмодинамический синтез (ПДС) как инструмент для прямого получения нанодисперсных кубических фаз карбидов вольфрама и молибдена. Данный метод позволяет работать в условиях экстремально быстрых фазовых переходов, необходимых для фиксации неравновесных состояний вещества. Таким образом, целью настоящего исследования является определение основных закономерностей синтеза метастабильных кубических карбидов W и Mo для создания высокоэффективных и недорогих электрокатализаторов.

Синтез осуществлялся в коаксиальном магнитоплазменном ускорителе при энергии накопителя 27 кДж (емкость 6,0 мФ, напряжение 3,0 кВ) в атмосфере аргона. В качестве прекурсоров использовали порошки вольфрама или молибдена и графита. Показано, что в системе W–C формируется дисперсный продукт с преимущественным содержанием нестехиометрического кубического карбида вольфрама γ-WC_{1-x}, достигающим 95 масс. % при атомном соотношении углерода к вольфраму 1,70. Кристаллическая решетка идентифицирована как гранецентрированная кубическая с параметром 4,2535 Å, что соответствует стехиометрии $WC_{0,86}$. По данным просвечивающей электронной микроскопии, частицы γ-WC_{1-x} имеют монокристаллическую структуру (рис. 1), размерами до 50–60 нм и заключены в углеродную оболочку толщиной 5–8 атомных слоев, а также находятся в аморфной углеродной матрице, образуя композит типа «ядро-оболочка» WC_{1-x}@C. Установлено, что соотношение прекурсоров [C]/[W] критически влияет на выход кубической фазы: при недостатке углерода возрастает доля гексагонального W_2C и свободного вольфрама, а при значительном избытке увеличивается содержание свободного углерода.

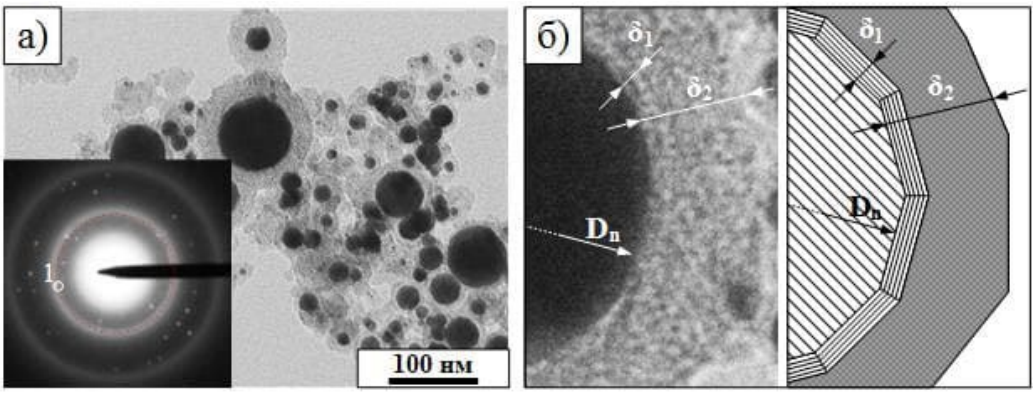


Рис. 1. Светлопольный TEM-снимок и SAED с этого скопления (а), строение частицы продукта плазмодинамического синтеза системы W-C (б)

Электрохимические испытания в реакции выделения водорода показали, что чистая фаза WC_{1-x} в углеродной матрице обладает умеренной активностью с перенапряжением около 795 мВ при 10 мА/см². Модификация поверхности частиц платиной в количестве 1–10 масс. % резко улучшает каталитические свойства: для 10Pt- WC_{1-x}@C перенапряжение снижается до 127 мВ, а тафелевский наклон составляет 32 мВ/дек, что близко к коммерческому катализатору Pt/C (28 мВ/дек). Катализаторы на основе WC_{1-x}@C демонстрируют высокую стабильность после 1000 циклических испытаний.

Перенос подобранных условий ПДС на систему Mo–C позволил синтезировать кубический карбид молибдена $MoC_{0,681}$ с параметром решетки 4,2638 Å и с содержанием MoC_{1-x} более 95 %. Структура частиц аналогична системе W–C: монокристаллические ядра MoC_{1-x} покрыты углеродной оболочкой и окружены аморфной углеродной матрицей.

Таким образом, плазмодинамический синтез обеспечивает стабилизацию метастабильных кубических фаз карбидов вольфрама и молибдена в форме композитов «ядро-оболочка» с углеродом. Полученные материалы перспективны как основа для эффективных и недорогих электрокатализаторов для водородной энергетики, особенно в качестве носителей для малых количеств платины.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 26-79-10179, https://rscf.ru/project/26-79-10179/

Литература

1. J.A. Schaidle, L.T. Thompson, Fischer–Tropsch synthesis over early transition metal carbides and nitrides: CO activation and chain growth. J. of Catalysis, 2015, 329, 325-334.
2. D.V. Suetin, I.R. Shein, A.L. Ivanovskii, Structural, electronic properties and stability of tungsten mono- and semi-carbides: A first principles investigation. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 2009, 70(1), 64-71.
3. M. Khoshooei, G. Vitale, L. Carbognani, et al. Evidence of water dissociation and hydrogenation on molybdenum carbide nanocatalyst for hydroprocessing reactions. Catalysis Science & Technology, 2022, 12(20), 6184-6194.
4. A.S. Kurlov, A.I. Gusev, Tungsten carbides and W-C phase diagram. Inorganic Materials, 2006, 42(2), 121-127.

МЕХАНИЗМЫ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ ЗАКАЛЕННОЙ ПЕРЛИТНОЙ СТАЛИ ЗАЭВТЕКТОИДНОГО СОСТАВА ПРИ РАСТЯЖЕНИИ И СЖАТИИ

С.А. Невский, Л.П. Бащенко, В.Е. Громов Д.Д., Михайлов

Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк
nevskiy.sergei@ yandex.ru

В современных условиях в процессе эксплуатации железных дорог жесткие требования предъявляются к основному элементу пути – рельсам, что объясняется увеличением скорости движения и ростом нагрузок. При воздействии колес в головке рельсов (в зоне контакта) возникают сжимающие и растягивающие напряжения, которые приводят к деградации структуры стали и, как следствие, к разрушению рельса. Именно боковой износ является в большинстве случаев причиной изъятия рельсов криволинейных участков пути из эксплуатации. Актуальна задача повышения механических и трибологических свойств рельсов в процессе эксплуатации и, соответственно, требуется разработка новых рельсовых сталей с повышенными износостойкостью и контактно-усталостной выносливостью.

Целью настоящей работы являлось установление природы и механизмов стадийности пластической деформации заэвтектоидной рельсовой стали.

В качестве материала исследования была выбрана заэвтектоидная перлитная сталь Э90ХАФ следующего состава (мас. %): C 0,92; Mn 0,81; Si 0,41; V 0,10; N 0,012; P 0,011; S 0,004; Al 0,003; Ti 0,003; Ni 0,15; Cu 0,08; Cr 0,34; остальное – железо. Образцы на испытания на растяжение и сжатие готовили из головки рельсов категории ДТ400ИК до их эксплуатации. Образцы на растяжение цилиндрической формы, длина рабочей части составляла 30 мм, диаметр 6 мм. Размеры образцов на сжатие призматической формы 5×5×10 мм.

Испытания на растяжение проводились на универсальной испытательной машине ZWICK-ROELL Z-250 со скоростью 0,008 $с^{-1}$. Деформация сжатием проводилась на универсальной электромеханической испытательной машине SUBRAMAX PM BC-50-A-1-0,2-II со скоростью деформации $8{,}3\cdot10^{-4}$ $с^{-1}$.

В ходе испытаний записывали кривые «деформирующее усилие – удлинение» (или укорочение), которые перестраивали в кривые «напряжение – деформация». Выявление и анализ стадий пластической деформации проводился с помощью уравнения Людвика:

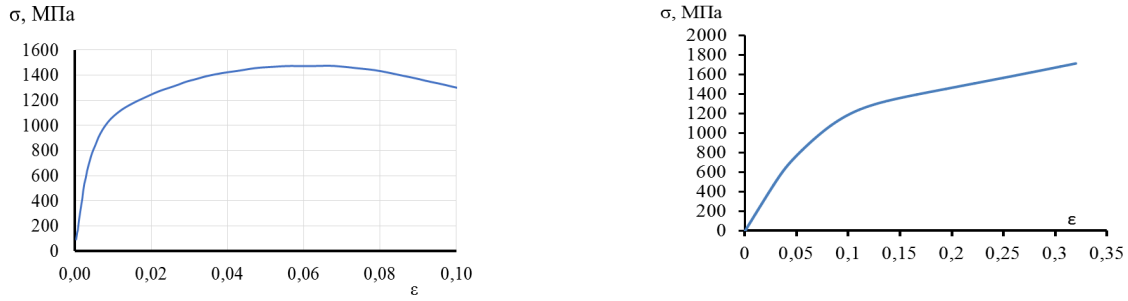
$$\sigma = \sigma_{0,2} + K\varepsilon^{n},$$

где $\sigma_{0,2}$ – условный предел текучести; K – коэффициент упрочнения; n – коэффициент ($n = 0$ соответствует площадке текучести, $n = 1$ – линейному деформационному упрочнению, $n \approx 1/2$ – стадии параболического деформационного упрочнения, $n < 1/2$ – стадии предразушения).

Образцы на растяжение и сжатие исследовались с помощью сканирующего электронного микроскопа KYKY-Em 6900 с приставкой для рентгеноспектрального анализа. У образцов на растяжение исследовали поверхность разрушения, у образцов на сжатие – боковую поверхность. Используемый микроскоп позволяет получать изображения во вторичных и первичных (упруго отраженных) электронах и в характеристическом рентгеновском излучении.

На рис. 1 представлены кривые зависимости напряжение – деформация при растяжении и сжатии. Условный предел текучести на растяжение составляет 1037,9 МПа, а значение предела прочности 1472,33 МПа. Максимальная деформация при его достижении составляет 6,6 %. Анализ кривой растяжения (рис. 1, *а*) показал, что стадии площадки текучести и линейного деформационного упрочнения не наблюдаются. После достижения предела текучести наблюдается переход в стадию параболического упрочнения, а затем в

стадию предразрушения. Зависимость σ – ε на стадии параболического упрочнения описывается уравнением $\sigma = 1037{,}9 + 20029\varepsilon^{1/2}$ МПа с коэффициентом корреляции 0,9683, тогда как на стадии предразрушения – $\sigma = 1037{,}9 + 20029\varepsilon^{0{,}1023}$ с коэффициентом корреляции 0,7566.

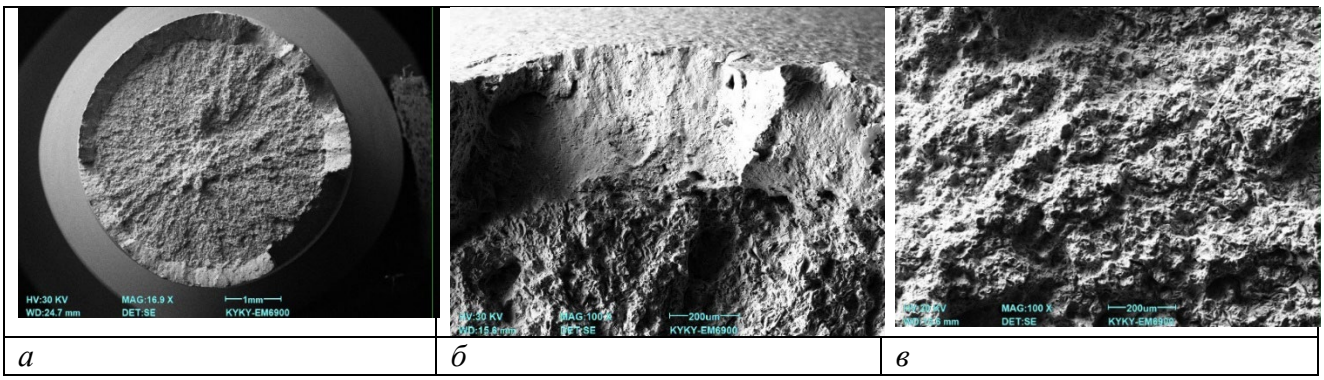


а б

Рис. 1. Деформационные кривые заэвтектоидной рельсовой стали при растяжении (*а*) и сжатии (*б*)

При сжатии (рис. 1, *б*) предел текучести составляет 1034,2 МПа. После его достижения наблюдается стадия линейного упрочнения, которая описывается уравнением σ = 1034,2 + 2135,5ε МПа, коэффициент корреляции 0,9976. Разрушения образца не наблюдается. Максимальное напряжение составляет 1714,56 МПа при деформации образцов 31,98 %, что свидетельствует о сильной деформируемости заэвтектоидной рельсовой стали.

На рис. 2 представлены фрактограммы поверхности разрушения рельсовой стали при растяжении.



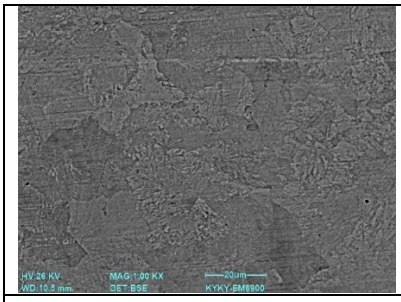
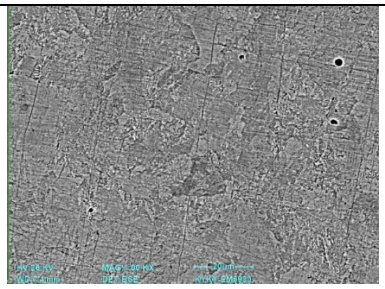
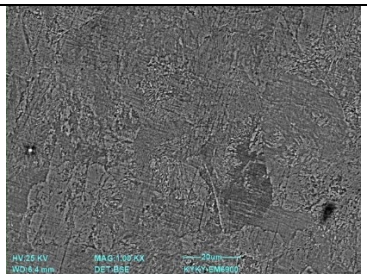
а	*б*	*в*

Рис. 2. Фрактограммы поверхности разрушения рельсовой стали при растяжении: *а* – общий вид; *б* – край образца; *в* – центральная часть

Для рельсовой стали наблюдается классическая картина вязкого излома типа «чашечки» с волокнистой зоной в центральной части образца (рис. 2, *а*, *в*), а также с зоной среза и радиальной зоной (рис. 2, *б*) на краях образца. Подобные картины наблюдались и ранее. Причиной формирования такого рельефа поверхности, по-видимому, является то, что разрушение происходит по границам зерен.

На рис. 3. представлены результаты электронно-микроскопических исследований рельсовой стали до эксплуатации при разных степенях деформации сжатия. В исходном состоянии (до деформации (рис. 3, *а*)) структура представлена мелкодисперсным пластинчатым перлитом 2 балла, карбидной сеткой 1 балла и мелкими разрозненными участками феррита 1 балла, оцениваемыми соответственно по шкалам 1, 5 и 7 ГОСТ 8233 – 56. Материал содержит включения размерами примерно 15 – 17 мкм. На электронно-микроскопических изображениях обнаружен перлит с искривленными пластинами цементита, объемная доля которого составляет 7,8 % (рис. 3, *а*). На стадии линейного

упрочнения доля такого перлита увеличивается: при степени деформации 0,15 его объемная доля составляет 9 % (рис. 3, *б*), при степени деформации 0,3198 – 13,5 % (рис. 3, *в*).

а	б	в

Рис. 3. Микроструктура рельсовой стали без деформации (*а*) и при степени деформации сжатия 15 % (*б*) и 31,98 % (*в*)

Механические испытания заэвктетоидной стали на растяжение и сжатие показали стадийный характер пластической деформации. Пластическая деформация при растяжении содержит две стадии: стадию параболического упрочнения и стадию предразрушения. При сжатии, наоборот, наблюдается только стадия линейного упрочнения, разрушения материала не происходит. Полученные результаты обсуждены с позиции автоволновой модели пластичности, в которой учитывалась кривизна решетки в качестве управляющего параметра θ. Данный параметр введен в кинетическое уравнение, описывающее поведение амплитуды наиболее неустойчивой моды упругих смещений. В процессе растяжения причиной перехода в стадию параболического упрочнения после достижения предела текучести является формирование состояния деформированной системы, в котором длины и времена когерентностей параметров порядка q и p удовлетворяют условиям $l_q << l_p$, $\tau < l$ из-за наличия кривизны решетки ($\theta \neq 0$). При этом процесс образования стационарных полос локализации протекает медленнее, чем при $\theta = 0$.

В процессе деформации сжатия переход к линейной стадии упрочнения после достижения предела текучести может быть объяснен тем, что наличие кривизны решетки ($\theta \neq 0$) приводит к образованию структурно-фазового состояния рельсовой стали, которое обеспечивает условия $l_q < l_p$, $\tau > l$ и, как следствие, движущихся полос локализации вместо волны переключения.

В процессе исследования сделано предположение, что отсутствие разрушения рельсовой стали обусловлено формированием бегущего затухающего автосолитона вследствие того, что управляющий параметр θ, который характеризует кривизну решетки, не равен 0.

Обсуждены механизмы фрагментации перлита. На основе этого анализа высказано предположение, что фрагментация перлита как при растяжении, так и при длительной эксплуатации должна происходить следующим образом: под действием механических напряжений на атомном уровне происходит возбуждение динамического ближнего порядка, который характеризует мелкомасштабную моду деформации. Смещения атомов, в свою очередь, порождают крупномасштабную пространственную моду деформации с высокой релаксацией упругой энергии. Взаимодействие этих мод приводит к возникновению локализованных состояний – статических автосолитонов. Наличие развитых дефектных субструктур приводит к тому, что необходимо учитывать локальную неравновесность среды, связанную с конечной скоростью распространения динамического ближнего порядка. Учет локальной неравновесности среды в кинетических уравнениях показал, что формирование статического автосолитона происходит за гораздо большее время, чем без учета такого воздействия. Развитие вторичной моды деформации начинается гораздо раньше достижения параметром первого порядка максимального значения.

ОПТИМИЗАЦИЯ СОСТАВА И ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ ТРЕНИЯ КОМПОЗИТА КАРБИД КРЕМНИЯ – АЛМАЗ ДЛЯ БЕССМАЗОЧНЫХ УЗЛОВ ТРЕНИЯ

А.Н. Николаев[1], Н.Л. Савченко[2], Д.А. Дюскина[1], А.Д. Копылова[1]

[1]*НИЦ «Курчатовский институт» – ЦНИИ КМ «Прометей», Санкт-Петербург*
[2]*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск*
stirborn@yandex.ru

Алмаз обладает рекордными трибологическими свойствами, однако высокая стоимость ограничивает его применение в виде монолитных деталей или сплошной алмазной матрицы. Альтернативой выступают композиты «алмаз – карбид кремния», в которых SiC играет роль технологичной и жёсткой связки [1, 2]. Цель настоящей работы – поиск минимального экономически целесообразного содержания алмазной фазы в SiC-матрице, при котором достигается сверхнизкий коэффициент трения ($\mu < 0{,}1$) в условиях сухого скольжения.

Объектами исследования являлись реакционно-спечённые композиты на основе карбида кремния, модифицированные алмазными частицами двух фракций: крупной (200–250 мкм, АС160) и мелкой (20–28 мкм, АСМ 28/20) в количестве 10, 20 и 30 мас.%. В качестве связующего и источника активного углерода использовалась фенолформальдегидная смола (ФФС). После одноосного прессования под давлением 100 МПа и полимеризации при 180 °С заготовки инфильтрировались расплавом кремния (КР-00) при 1550 °С в вакууме в течение 15 мин. При 800 °С происходил пиролиз ФФС, при 1400 °С кремний реагировал с углеродом, формируя вторичный SiC и связывая алмазные зёрна в плотный монолит [3]. Трибологические испытания проводили по схеме «кольцо по кольцу» (оба кольца из композита одного состава) на машине трения УМТ 2168: нагрузка 1 МПа, площадь контакта 1,42 см², скорость скольжения 0,076 м/с, среда – воздух без смазки, длительность 1 ч (дистанция трения ~3800 м). Микроструктуру и состав трибослоев изучали методами СЭМ (Tescan Vega 3) и микрорентгеноспектрального анализа.

Установлено, что размер алмазных зёрен критически влияет на трибологические свойства. Композиты с крупными алмазами демонстрируют значительно более низкий коэффициент трения по сравнению с мелкозернистыми аналогами. Минимальный коэффициент трения $\mu = 0{,}08$, сопоставимый с парой «алмаз по алмазу» и в 9 раз ниже, чем у монолитного SiC ($\mu \approx 0{,}71$), достигнут в составах с 20 и 30 мас. % крупных алмазов. Увеличение доли алмаза с 20 до 30 мас. % не даёт существенного выигрыша по трению, но увеличивает стоимость материала, что делает состав К20 оптимальным. При содержании 10 мас. % алмаза несущая способность падает, нагрузка воспринимается матрицей и остаточным кремнием, что приводит к росту μ до 0,37–0,44 и интенсивному абразивному износу. Микроструктурный анализ показал, что в процессе трения происходит дифференциальный износ: более мягкая SiC-матрица изнашивается быстрее, обнажая твёрдые алмазные зёрна, которые формируют опорный каркас. В зонах фрикционного контакта инициируется трибохимическая графитизация алмаза и окисление кремнийсодержащих фаз. Формируется самосмазывающаяся углерод-кремнезёмная ($C–SiO_2$) трибоплёнка, обеспечивающая эффект граничной смазки и предотвращающая адгезионный износ. Прочность границы раздела «алмаз–SiC», обеспеченная реакционным спеканием, полностью исключает катастрофическое выкрашивание армирующих частиц.

Показана принципиальная возможность замены дорогостоящей алмазной матрицы на карбидокремниевую при сохранении сверхнизкого коэффициента трения. Оптимальным составом является композит с 20 мас.% крупных алмазов (200–250 мкм), обеспечивающий $\mu = 0{,}08$ и минимальный массовый износ. Механизм сверхнизкого трения обусловлен формированием несущего алмазного каркаса и трибохимического слоя $C–SiO_2$.

Разработанный материал обладает высоким потенциалом для применения в качестве торцевых уплотнений, подшипников скольжения в насосах, буровом и авиационном оборудовании, работающем в агрессивных средах и условиях вакуума без жидкостной смазки.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 21-73-30019-П).

Литература

1. С.К. Гордеев, А.Ю. Ежов, Т.Д. Каримбаев, С.Б. Корчагина, М.А. Мезенцев. Дисперсно-упрочнённые композиции «алмаз – карбид кремния» – новые материалы для машиностроения. Композиты и наноструктуры., 2015, 7(№2) 61-71.
2. S. Kunze, B. Matthey, M. Herrmann. SiC-bonded diamond material with excellent abrasive wear resistance. Open Ceramics., 2024, 19 100627.
3. M.A. Markov, D.A. Dyuskina, A.N. Nikolaev, A.N. Belyakov, A.G. Chekuryaev, A.D. Bykova, A.D. Kopylova. Determining the tribological characteristics of diamond ceramics in friction pairs with structural materials Novye Ogneupory., 2026, 5 24-31.

ЗАКОНОМЕРНОСТИ ДЕСОРБЦИИ ВОДОРОДА ИЗ МНОГОКОМПОНЕНТНОГО (ВЫСОКОЭНТРОПИЙНОГО) СПЛАВА CoCrFeMnNi, ЛЕГИРОВАННОГО АЗОТОМ И УГЛЕРОДОМ

А.С. Нифонтов, Е.Г. Астафурова

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики прочности и материаловедения им. В.Е. Панина СО РАН, Томск
alexeyn@ispms.ru

В работе проводили анализ спектров термодесорбции водорода из образцов сплава $(CoCrFeMnNi)_{99}N_{0,5}C_{0,5}$, подвергнутого электролитическому насыщению, выполняли разделение вкладов десорбции водорода из границ зерен и кристаллической решетки и определяли энергию активации этих процессов. Литые образцы сплава $(CoCrFeMnNi)_{99}N_{0,5}C_{0,5}$ были подвергнуты термомеханической обработке, которая включала отжиг 1200ºС в течение 2 часов, холодную прокатку при комнатной температуре до степени осадки 80% и финальный отжиг при температуре 1200ºС в течение 2 часов с последующим быстрым охлаждением в воду. Насыщение образцов водородом проводили электролитическим методом в 3 % водном растворе NaCl, содержащем 3 г/л NH_4SCN, в течение 50 ч при плотности тока 10 мА/см^2 при комнатной температуре. Для определения особенностей процессов адсорбции/десорбции водорода использовали метод термодесорбционной спектроскопии (ТДС) с использованием вакуумной камеры с одновременным сбором спектров термодесорбции квадрупольным масс-спектрометром RGA100 (Stanford Research Systems, США). Для определения энергии активации десорбции водорода нагрев образцов в спектрометре проводили при скоростях 2, 4 и 6 ºС/мин.

Образцы сплава $(CoCrFeMnNi)_{99}N_{0,5}C_{0,5}$ обладали гомогенной крупнокристаллической структурой с ГЦК кристаллической решеткой. Размер зерна составлял 201 ± 100 мкм. Исходя из вышеуказанных данных, в исследуемых образцах возможны только два типа «ловушек» для водорода – кристаллическая решетка и границы зерен.

Эксперименты по десорбции водорода из сплава $(CoCrFeMnNi)_{99}N_{0,5}C_{0,5}$ показали, что на ТДС-спектрах формируется только один пик, максимум для которого располагается при T≈160°C (4ºС/мин). Обычно его формирование связывают с выходом водорода из таких ловушек как границы зерен, кристаллическая решетка, вакансий, дислокаций и т.п. При этом пик размыт и асимметричен, что указывает на наложение процессов десорбции водорода из разного типа ловушек. Для описания результатов были проанализированы случаи разложения спектров на два, три и четыре составляющие. Для построения кривых была использована аппроксимация с использованием функции Гаусса. Показано, что наиболее точно полученные экспериментально ТДС-спектры описываются как результат наложения двух максимумов, что соответствует результатам исследования микроструктуры образцов, свидетельствующих о преобладании двух основных типов ловушек для ионов водорода – кристаллической решетки и границ зерен. Было выделено два спектра с близкими температурами максимумов, и на их основе рассчитана энергия активации для разных видов ловушек. Она составила E_a^1= 27,9 кДж/моль для границ зерен и E_a^2 = 31,2 кДж/моль для кристаллической решетки. Несмотря на то, что разложение ТДС-спектра на два пика может также отражать не только индивидуальную десорбцию водорода из легко обратимых ловушек, таких как дислокации, вакансии и границ зёрен, но также динамически развивающиеся диффузионно-десорбционные процессы внутри образца (взаимную диффузию из границ зерен в решетку и обратно в процессе нагрева), используемый подход описывает ТДС-спектры с высоким коэффициентом корреляции.

Исследование выполнено в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН (FWRW-2026-0006). Исследования выполнены с использованием оборудования ЦКП «Нанотех» ИФПМ СО РАН.

ЭВОЛЮЦИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ И ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ В РЯДУ СЛОИСТЫХ СОЕДИНЕНИЙ $TiSe_2$ – $Fe_{0.9}TiSe_2$

Н.М. Носова, Н.В. Селезнева

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург
toporova.natalia@urfu.ru

Дихалькогениды переходных металлов TCh_2 (T – переходный металл, Ch = S, Se, Te) представляют собой семейство квазидвумерных слоистых материалов, обладающих физико-химическими свойствами, важными для практических приложений [1]. Слабая ван-дер-ваальсова связь между трехслойными блоками позволяет внедрять в межслоевое пространство различные атомы, в том числе обладающих магнитным моментом [2]. При высоких концентрациях внедренных атомов M ($x \geq 0.25$) в соединениях M_xTCh_2 может возникать упорядочение атомов и вакансий в ван-дер-ваальсовых щелях, а также сверхструктуры, что открывает путь к целенаправленному управлению свойствами в широких пределах. Особое место в этом семействе занимает диселенид титана, демонстрирующий переход в состояние с волной зарядовой плотности (ВЗП) при $T \sim 200$ К. Внедрение железа в $TiSe_2$ позволяет эффективно модифицировать его кристаллическую и электронную структуру, а также магнитные характеристики. Однако, несмотря на интенсивные исследования системы Fe_xTiSe_2, основная часть работ ограничена областью низких и средних концентраций железа ($x \leq 0.66$) из-за трудностей синтеза фаз с более высоким содержанием Fe. Вместе с тем именно соединения с повышенным содержанием интеркалированных 3d-элементов нередко проявляют физико-химические свойства, важные для практических приложений. Таким образом, задача преодоления концентрационного предела для внедряемых атомов 3d-металлов остается нерешенной и сохраняет свою актуальность.

В настоящей работе был успешно синтезирован новый слоистый материал $Fe_{0.9}TiSe_2$ с высоким содержанием железа, где в качестве прекурсора использовали соединение $Fe_{0.5}TiSe_2$. Возможность такого синтеза обусловлена более лабильной моноклинной структурой соединений типа $M_{0.5}TiCh_2$, в которой и атомы титана, и атомы халькогена обладают бóльшим числом степеней свободы по сравнению с исходными дихалькогенидами $TiCh_2$. Чтобы проследить, как изменяются кристаллическая структура и физические свойства при увеличении содержания железа в системе Fe_xTiSe_2, для всех трех соединений – исходного $TiSe_2$, прекурсора $Fe_{0.5}TiSe_2$ и конечного $Fe_{0.9}TiSe_2$ – были проведены рентгеновская дифракция и измерения магнитных и транспортных характеристик.

Размещение атомов железа в межслоевом пространстве приводит к ожидаемому увеличению объема элементарной ячейки и изменению симметрии решетки от гексагональной сингонии с пространственной группой $P\bar{3}m1$ ($TiSe_2$) к моноклинной $I2/m$ ($Fe_{0.5}TiSe_2$) и $P2/c$ ($Fe_{0.9}TiSe_2$) вследствие упорядочения атомов Fe. Удельное сопротивление $Fe_{0.9}TiSe_2$ имеет отрицательный температурный коэффициент во всем исследованном интервале температур и испытывает аномально резкое изменение в диапазоне 100–150 К, сопровождающееся заметным гистерезисом. В отличие от антиферромагнитного упорядочения, наблюдаемого в прекурсоре $Fe_{0.5}TiSe_2$, новое соединение с высоким содержанием железа $Fe_{0.9}TiSe_2$ демонстрирует ферримагнитное поведение ниже температуры упорядочения 147 К, а коэрцитивная сила при 2 К достигает 15 кЭ. Таким образом, данное соединение характеризуется тесной взаимосвязью между волной зарядовой плотности и

ферримагнитным порядком. Для более детального определения типа магнитного упорядочения и уточнения магнитной структуры требуются дальнейшие исследования методом нейтронной дифракции.

Литература

1. B. Zhao, D. Shen, Z. Zhang, P. Lu, M. Hossain, J. Li, B. Li, X. Duan. 2D Metallic Transition-Metal Dichalcogenides: Structures, Synthesis, Properties, and Applications. Adv. Funct. Mater., 2021, 31, 2105132.
2. M. Inoue, H.P. Hughes, A.D. Yoffe. The electronic and magnetic properties of the 3d transition metal intercalates of TiS_2. Adv. Phys., 1989, 38, 565-604.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 25-73-00211

ВЛИЯНИЕ СТАРЕНИЯ ПРИ 700 °С НА ОСОБЕННОСТИ МИКРОСТРУКТУРЫ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФЕРРИТНО-МАРТЕНСИТНОЙ СТАЛИ ЭП-823

В.В. Осипова, Н.А. Полехина, И.Ю. Литовченко

Институт физики прочности и материаловедения им. В.Е. Панина СО РАН, Томск
lera.linnik.1999@mail.ru

В настоящей работе методами просвечивающей и растровой электронной микроскопии, а также в условиях испытаний на растяжение исследованы особенности микроструктуры и механические свойства 12 % хромистой ферритно-мартенситной стали ЭП-823 (Fe-12Cr-Mo-W-Si-V-W-Nb). Старению подвергались образцы в двух структурных состояниях: после традиционной термической обработки (ТТО) (нормализация 1100 °С, 1 ч + отпуск 720 °С, 3 ч) и после высокотемпературной термомеханической обработки (ВТМО) (нагрев 1100 °С, 1 ч + деформация ε ≈ 50% с закалкой в воду + отпуск 720 °С, 1 ч).

Микроструктура стали после двух обработок качественно подобна и подробно представлена в [1]. После ВТМО наблюдается измельчение зеренно-субзеренной структуры, повышение плотности дислокаций и объемной доли наноразмерных частиц карбонитридов MX, уменьшение размеров и объемной доли карбидов $M_{23}C_6$, по сравнению с ТТО, что обеспечивает повышение прочностных свойств на 20 % в широком температурном интервале.

После старения стали независимо от предшествующей обработки микроструктура представлена отпущенными мартенситными ламелями и ферритными зернами, а также дисперсными частицами вторых фаз. Важно отметить, что новых фаз, образованных при старении, не обнаружено. В условиях старения происходит уширение мартенситных ламелей, снижение плотности дислокаций и рост частиц $M_{23}C_6$ относительно исходных состояний. При этом средние размеры карбидов $M_{23}C_6$ после ВТМО ниже, чем после ТТО. После старения наблюдается снижение прочностных свойств и повышение пластичности стали, обусловленные указанными изменениями микроструктуры.

После старения в течение 500 часов значительная часть микроструктуры представлена фрагментированным ферритом, в локальных участках сохраняется мартенситная структура. Тенденция к укрупнению субзеренной структуры сохраняется, при этом мартенситные блоки в условиях старения не изменяют своих размеров. Длительное старение приводит к снижению доли малоугловых и повышению доли близких к двойниковым границ разориентации. С увеличением времени старения прочностные свойства продолжают снижаться, относительно исходного состояния.

Следует отметить, что после высокотемпературной термомеханической обработки и старения средние размеры структурных элементов остаются меньшими, а плотность дислокаций более высокой, по сравнению с состоянием после традиционной термической обработки и старения. Кроме того, несмотря на значительное снижение механических свойств в условиях старения, после ВТМО они остаются на более высоком уровне, относительно ТТО.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема номер FWRW-2026-0005.

1. I. Litovchenko, K. Almaeva, N. Polekhina, S. Akkuzin, V. Linnik, E. Moskvichev, V. Chernov, M. Leontyeva-Smirnova. The microstructure and mechanical properties of ferritic-martensitic steel EP-823 after high-temperature thermomechanical treatment. Metals, 2022, 12 Art.79

АНАЛИЗ СТРУКТУРНОЙ РЕЛАКСАЦИИ В ДИНАМИЧЕСКИ-ГЕТЕРОГЕННЫХ ЭПОКСИДНЫХ ПОЛИМЕРАХ

К.А. Пасечник, А.Ю. Власов, А.А. Мирошниченко, И.В. Обверткин

Сибирский государственный университет науки и технологий имени академика М.Ф. Решетнева, Красноярск
kir.nik@mail.ru

Описание структурной релаксации в стеклующихся полимерах опирается на совместное использование функции Кольрауша–Вильямса–Ваттса (KWW) для изотермических кривых и уравнения Фогеля–Фулчера–Таммана (VFT) для температурной зависимости характерного времени релаксации. Для термореологически простых систем параметр неэкспоненциальности β_{KWW} принимается постоянным. В высокосшитых эпоксидных полимерах, структура которых содержит плотные кластеры, разделённые менее сшитыми областями, динамическая гетерогенность вызывает зависимость β_{KWW} от температуры [7, 8, 9, 10, 11]. Как следствие, стандартная модели VFT и KWW не позволяют с приемлемой точностью описать семейство изотерм единым набором параметров.

В отличие от традиционной модели VFT, оперирующей единственным значением температуры Фогеля T_v, для динамически гетерогенных систем вводиться спектр распределения $g(T_v)$, а наблюдаемый релаксационный отклик формируется как суперпозиция вкладов отдельных динамических процессов, протекающих в каждом домене, каждый из которых характеризуется собственным значением T_v и описывается функцией KWW. Температурная зависимость характерного времени релаксации для каждого домена задаётся уравнением VFT с общими для всей системы параметрами D и τ_0. Применение модели к экспериментальным данным требует одновременного описания всей совокупности изотерм, полученных для образца с фиксированной степенью конверсии. Задача сводится к нахождению функции распределения $g(T_v)$ и глобальных параметров D, τ_0, β_{inner}, обеспечивающих соответствие расчётных кривых релаксации эксперименту во всём исследованном температурном диапазоне.

Цель работы — разработка методики построения спектра распределения температур Фогеля $g(T_v)$ как непрерывной функции степени конверсии в динамически гетерогенных полимерах.

В настоящей работе регистрация зависимости релаксационного модуля при изотермической выдержке в области стеклования и ниже T_gпроведены для серии образцов эпоксидного полимера, полученных полимеризацией при различных температурах и времени. Варьирование условий полимеризации обеспечило набор образцов с известной степенью конверсии, различной средней плотностью сшивки. Для каждого образца получен ряд изотерм релаксации напряжений. Анализ экспериментальных данных указывает на систематическое расхождение с моделью VFT, что делает обоснованным применение подхода, явно учитывающего распределение локальных динамических параметров.

Для каждого образца получено семейство кривых релаксации $\varphi(t,T)$ при фиксированных температурах (рис. 1). Релаксационная функция записывается в виде [14]:

$$\varphi(t,T) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(\ln\tau, T) \exp\left[-\left(\frac{t}{\tau(T)}\right)^{\beta_{inner}}\right] d\ln\tau \qquad (1)$$

где $G(\ln\tau, T)$ – плотность распределения логарифма характерного времени релаксации при температуре T, t – время, β_{inner} - коэффициент внутренней неэкспоненциальности доменов.

Распределение времён релаксации моделируется на основе уравнения VFT, температура Фогеля T_v которого рассматривается как распределённый параметр с плотностью $g(T_v)$. Введение распределения $g(T_v)$ явным образом учитывает структурную

гетерогенность материала, представляя его как систему доменов с различными локальными динамическими характеристиками.

На основании уравнения VFT, температура $T_{v,i}$ при температуре T_g:

$$T_{v,i} = T_g \frac{\ln(\tau_i/\tau_0)}{D + \ln(\tau_i/\tau_0)} \quad (2)$$

где τ_i – характерное время релаксации домена i при температуре T_g, τ_0 – предэкспоненциальный множитель, D – параметр хрупкости. Спектр $H(\tau_i)$ при T_g отражает структурную гетерогенность системы и является константой материала для данного структурного состояния.

При $T \neq T_g$ распределение $G(ln\ \tau_i, T)$ связано с $g(T_{v,i})$ нелинейным соотношением:

$$G(ln\ \tau_i, T) = \frac{g(T_{v,i})}{L(T)} \frac{T}{D}\left(1 - \frac{T_{v,i}}{T}\right)^2 \quad (3)$$

где $L(T)$ – нормировочный множитель, обеспечивающий $\int G(ln\ \tau_i, T)\, d\, ln\ \tau = 1$. В вычислительной реализации непрерывное распределение заменяется дискретными весами: $Y_i = g(T_{v,i})$ и $X_i = G(\ln \tau_i, T)$, при этом $\sum X_i = 1, \sum Y_i = 1$.

Распределение Y_i может аппроксимировать известными аналитическими функциями, или определяться без предположений о форме распределения — оптимизацией весов Y_i как независимых переменных с регуляризацией по Тихонову:

$$\min_{\mathbf{Y}}(\|\boldsymbol{\psi}(\mathbf{Y}) - \boldsymbol{\psi}^{exp}\|^2 + \alpha\|\mathbf{L}(\mathbf{Y})\|^2) \quad (4)$$

Параметры D, τ_0 и β_{inner} устанавливались по экспериментальным данным оптимизацией параметров модели одновременно по всем изотермам. Для поиска численного решения использовался эволюционный алгоритм NSGA-III [16, 17]. Относительная погрешность описания экспериментальных кривых 1 %. По результатам оптимизации β_{inner}≈0,998, что говорит о том, что неэкспоненциальность релаксационных кривых полностью обусловлена модельным распределением температуры Фогеля в структуре доменов. В качестве критерия стеклования $T_g^{ДМА}$ принято характерное время релаксации 100 s (спад нормированного напряжения до $1/e$). Соотношение $\langle T_v \rangle / T_g^{ДМА} \approx 0.31$ прямо следует из уравнения VFT при фиксированных D, τ_0 и определяется значениями этих параметров. Выполнение данного соотношения для всех исследованных конверсий при точном описании экспериментальных кривых подтверждает согласованность модели с данными. Спектр $T_{v,i}$ рассчитанный по уравнениям 1-4 представлен на рисунке 1.

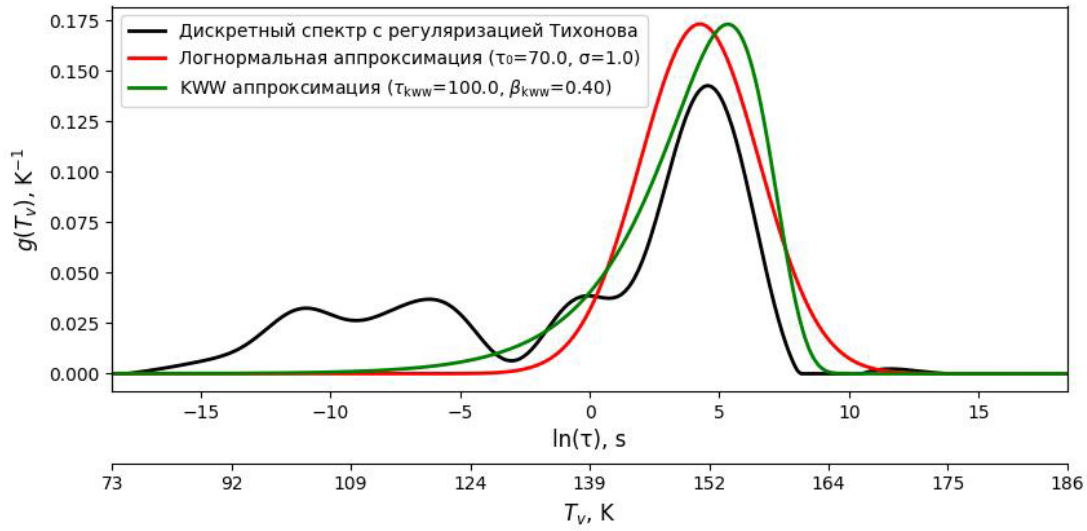


Рис. 1. Спектр $g(T_{v,i})$ образца α≈1. Дискретный спектр получен оптимизацией весов Y_i с последующей регуляризацией по Тихонову.

С увеличением степени конверсии α спектр $g(T_{v,i})$ приобретает выраженную асимметрию, вытягиваясь в область низких температур Фогеля. Для описания релаксации при произвольной конверсии α необходимо представление спектра распределения температур Фогеля как непрерывной функцией $g(T_{v,i}, \alpha)$, которая в данной работе реализована методом квантильной интерполяции спектров.

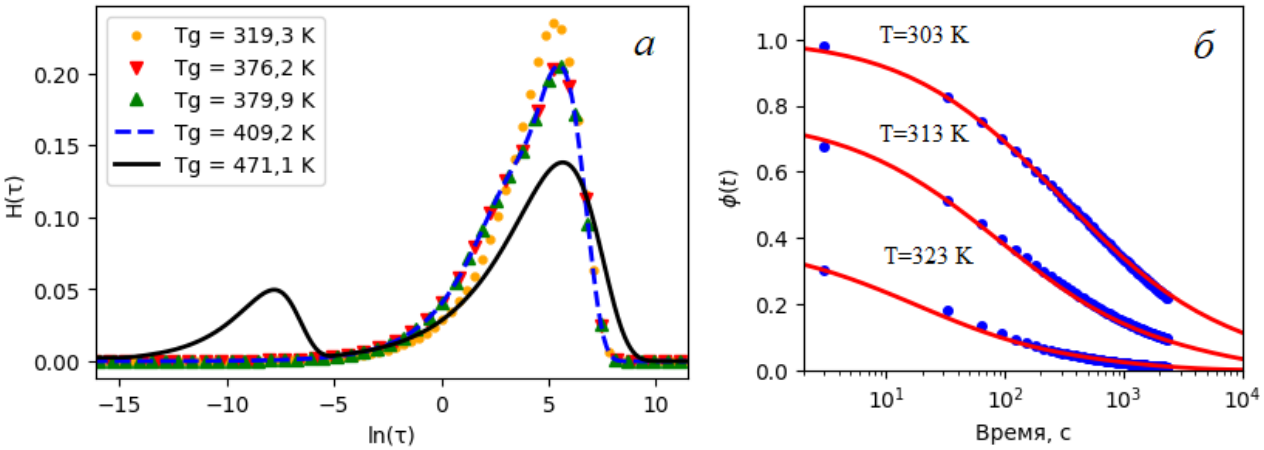


Рис. 2. Спектры $H(\tau_i)$ для различных конверсий, восстановленные из сглаженных релаксационных кривых с помощью регуляризованного обратного преобразования Лапласа и используемые для квантильной интерполяции $g(T_{v,i}, \alpha)$ (а). Измеренные и модельные релаксационные кривые для образца с T_g=319,3 K (б).

Такой подход позволяет с приемлемой точностью воспроизвести асимметрию спектра с увеличением вклада доменов в область низких температур Фогеля (рисунок 2) при увеличении степени конверсии и обеспечить гладкую интерполяцию по α. Построенная зависимость спектра $g(T_{v,i}, \alpha)$ позволяет рассчитать релаксационную функцию $\psi(t, T)$ для произвольных температуры и конверсии в рамках полной физической модели VFT с распределением температур Фогеля. Для использования в инженерных расчётах полученные релаксационные кривые могут быть разложены в ряд Прони стандартными методами.

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках государственного задания №FEFE-2026-0004 «Разработка методологии создания геометрически стабильных структур из композиционного материала и конструктивно-компоновочных схем крупногабаритных трансформируемых конструкций для беспилотных стратосферных платформ» по заказу Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Литература

1. T. Hoshino, Y. Okamoto, A. Yamamoto et al. Sci. Rep., 11, 9767 (2021). DOI: 10.1038/s41598-021-89155-x.
2. H. Nguyen, A. Shundo, S. Yamamoto, K. Tanaka, K. Nakajima. Polym. J., 57 (2024). DOI: 10.1038/s41428-024-01006-4.
3. K.A. Masser, D.B. Knorr, M.D. Hindenlang, J.H. Yu, A.D. Richardson, K.E. Strawhecker, F.L. Beyer, J.L. Lenhart. Polymer, 58, 96 (2015). DOI: 10.1016/j.polymer.2014.12.027.
4. S. Yamamoto, R. Ida, M. Aoki, R. Kuwahara, A. Shundo, K. Tanaka. Macromolecules, 56 (11), 3913 (2023). DOI: 10.1021/acs.macromol.3c00411.
5. A. Shundo, S. Yamamoto, K. Tanaka. JACS Au, 2, 1522 (2022). DOI: 10.1021/jacsau.2c00120.
6. W. Takeda, P. Lucas. J. Chem. Phys., 160 (17), 174504 (2024). DOI: 10.1063/5.0196812.
7. D. Cangialosi, A. Alegría, J. Colmenero. J. Chem. Phys., 130 (12), 124902 (2009).

МЕХАНИЧЕСКИЕ ИСПЫТАНИЯ УГЛЕПЛАСТИКОВЫХ ЭЛЕМЕНТОВ КОНСТРУКЦИИ ПРОТЕЗОВ СТОП

К.Е. Первухин, А.А. Филиппов

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт машиноведения имени Э.С. Горкунова Уральского отделения Российской академии наук, ул. Комсомольская, 34, Екатеринбург, 620049, Россия
kirillpervukhin@mail.ru

Углепластиковые композиционные материалы (УКМ) обладают уникальными свойствами, такими как высокая удельная прочность и жесткость, низкий вес, устойчивость к коррозии и агрессивным средам. В настоящее время разработка и совершенствование УКМ является актуальной задачей. Особое внимание уделяется созданию изделий для биомедицинской сферы: ортезов, протезов, элементов экзоскелетных механизмов и т.д. [1–3], поскольку конструкции из традиционных материалов имеют значительный вес, что существенно снижает мобильность пациентов и эффективность их восстановления. При проектировании протезов стоп ключевой задачей является достижение оптимальной жесткости конструкции, обеспечивающей комфорт пациента и эффективную биомеханическую поддержку.

Надежность и безопасность протезов во многом определяются проведением механических испытаний. При этом для отдельных элементов конструкции ESR‑протезов (ESR – energy storing and releasing), которые при ходьбе запасают и затем высвобождают упругую энергию деформации [1, 4, 5], пока не существует универсальных стандартов испытаний. В связи с этим используются различные методики [6, 7], что затрудняет сравнение результатов и внедрение новых решений.

Целью настоящей работы являлась экспериментальная оценка механических характеристик материалов, использующихся в конструкции ESR‑протезов стопы категории К2-К3 [8, 9].

Кроме того, в настоящей работе проведено сравнение упруго-прочностных характеристик конструкций протезов стоп человека при различных схемах нагружения, полученных методами вакуумной инфузии (ВИ) и прямого прессования препрега (ПП).

Варьирование технологии изготовления, типа углеткани, количества слоев и направления их укладки позволило изменять механические свойства конструкции в широких диапазонах. Особенностью рассматриваемых элементов конструкций протезов является добавление слоев резины в структуру укладки углеткани, позволяющее существенно повысить деформацию разрушения.

Удельная жесткость конструкции определялась на изгиб тремя схемами испытаний [10]. Зависимости удельной жесткости от типа полученных заготовок качественно совпадают при различных схемах испытаний. Из предложенных схем испытаний выбрана схема (рис. 1), позволяющая испытывать как отдельный элемент конструкции, так и в сборе.

Установлено, что в зависимости от ориентации и содержания различных слоев углеткани возможно управлять модулем упругости материала в диапазоне от 20 до 160 ГПа. Выявлено, что материалы, изготовленные методом ПП, демонстрируют более высокий модуль упругости по сравнению с образцами, полученными методом ВИ. Это обусловлено более высокой объемной концентрацией углеволокна. Варьирование размерами элемента конструкции и добавление слоев резины позволило получить значения жесткости 20–40 Н/м. Полученные значения сопоставимы с характеристиками существующих аналогов.

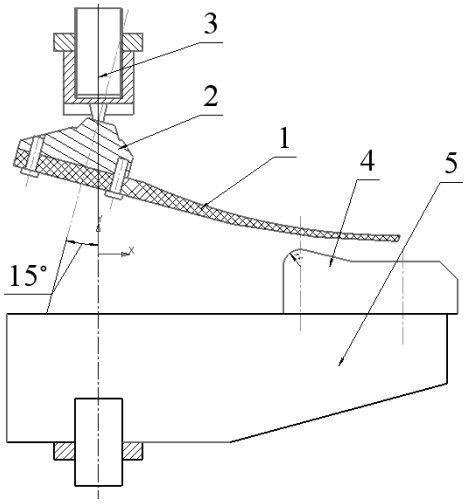


Рис. 1. Схема испытания элементов конструкции протеза стопы: 1 – элемент конструкции, 2 – приспособление для крепления кронштейна, 3 – верхняя подвижная опора, 4 – нижняя неподвижная опора 5 - платформа

Технологии ПП и ВИ подходят для изготовления элементов конструкций протезов стоп, поскольку обеспечивают высокое содержание углеволокна, низкую пористость заготовок и прогнозируемые упругие свойства УКМ. Полученные данные в дальнейшем будут использованы для прогнозирования свойств разрабатываемых материалов.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России по теме № 124070500003-6. При проведении исследований использовано оборудование ЦКП «Пластометрия».

Литература

1 J.K. Oleiwi, A.N. Hadi. Properties of Materials and Models of Prosthetic Feet: A Review. IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng., 2021, 1094, 12151.
2 H.H. Warder, J.K. Fairley, J. Coutts, R.R. Glisson, K. Gall. Examining the Viability of Carbon Fiber Reinforced Three‐Dimensionally Printed Prosthetic Feet Created by Composite Filament Fabrication. Prosthet. Orthot. Int., 2018, 42(6), 644–651.
3 V. Vijayan, S.A. Kumar, S. Gautham, M.M. Masthan, N. Piraichudan. Design and Analysis of Prosthetic Foot Using Additive Manufacturing Technique. Mater. Today Proc., 2020, 37(2), 1665–1671.
4 S. Arunkumar, S. Mahesh, M. Rahul, N. Ganesh, K.J. Maheshwaran. Design and Analysis of Lower Limb Exoskeleton with External Payload. Int. J. Interact. Des. Manuf., 2023, 17(4), 2055–2072.
5 J. Tabucol, T.M. Brugo, M. Povolo, M. Leopaldi, M. Oddsson, R. Carloni, A. Zucchelli. Structural FEA‐Based Design and Functionality Verification Methodology of Energy‐Storing‐and‐Releasing Prosthetic Feet. Appl. Sci., 2021, 12(1), 97.
6 H.H. Warder. Examining the Viability of Carbon Fiber Reinforced Three‐Dimensionally Printed Prosthetic Feet Created by Composite Filament Fabrication. Prosthet. Orthot. Int., 2018, 42(6), 644–651.
7 S. Norooz. The Dynamic Elastic Response to Impulse Synchronisation (DERTIS) of Composite Prosthetic Energy Storing and Returning Feet. J. Sports Eng. Technol., 228(1), 24–32.
8 R. Elgamsy. Localization of Composite Prosthetic Feet: Manufacturing Processes and Production Guidelines. Sci. Rep., 2023, 13(1).
9 E.A. Abbod, K.K. Resan. Review on the Interface Pressure Measurement for Below‐Knee Prosthetic Socket. IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng., 2021, 1094, 012036.
10 А.А. Филиппов, К.Е. Первухин, Ю.Д. Карнаухов, Е.А. Лутошкин, В.М. Лосев. Оценка механических свойств элементов конструкции углепластиковых заготовок протезов стоп. Вестник ПНИПУ. Механика, 2025, 6, 135–144. DOI: 10.15593/perm.mech/2025.6.12.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАЛЕЧИВАНИЯ ТРЕЩИН

М.Н. Перельмутер

Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва
perelm@ipmnet.ru

Моделирование процессов залечивания трещин позволяет дополнить и ускорить экспериментальные исследования. В данной работе для моделирования залечивания трещин используется модель, основанная на объединении модели концевой области трещины и кинетической термофлуктуационной теории [1].

Рассмотрение процесса залечивания трещины (формирования связей между берегами трещины - восстановление сплошности материала) основано на следующих допущениях: 1) в начальный момент времени в трещину на границе соединения материалов попадает «залечивающая» жидкость – полимер; 2) степень заполнения трещины полимером определяет размер концевой области трещины, образующейся в процессе самозалечивания; 3) в трещине начинается процесс полимеризации, приводящий к формированию связей между поверхностями трещины; 4) плотность связей между поверхностями трещины является возрастающей функцией времени; 5) возрастание плотности связей между поверхностями трещины сопровождается увеличением жёсткости связей. При моделировании процесса формирования связей полагается, что возрастание плотности связей $n_h(x,t)$ между поверхностями трещины определяется кинетическим уравнением первого порядка [2]:

$$\frac{dn_h(x,t)}{dt} = \frac{n_0 - n_h(x,t)}{\tau_h(x,\sigma)} \tag{1}$$

где n_0- максимальная плотность связей между берегами трещины, $\tau_h(x,\sigma) = \psi(x,\sigma)A(T)$- характеристическое время восстановления связи, $A(T) = \tau_0\, exp\left(\frac{U_h}{RT}\right)$, $\tau_0 = \alpha h/kT$, h - постоянная Планка, k - постоянная Больцмана, T - абсолютная температура, α - безразмерный коэффициент, зависящий от типа материала (полимер, металл, керамика), U_h- энергия активации восстановления связей, R - универсальная газовая постоянная. Безразмерная функция $\psi(x,\sigma)$ определяет зависимость времени восстановления связей от расстояния до вершины трещины и внешней нагрузки, σ -напряжение в связи. Решение уравнения (1) (при начальном условии $n(x,0) = 0$) даёт зависимость от времени плотности связей, формирующихся между берегами трещины

$$n_h(x,t) = n_0 Z(x,t,\sigma), \quad Z(x,t,\sigma) = 1 - exp\big(-t/\tau_h(x,\sigma)\big) \tag{2}$$

Увеличение плотности связей со временем приводит к возрастанию жесткости связей в концевой области трещины. Обозначим жесткость одной молекулярной связи $k_s(x)$. Тогда эффективная жесткость связей на единицу площади концевой области трещины

$$k(x,t,\sigma) = k_s(x)n_h(x,t) = k_b Z(x,t,\sigma), \tag{3}$$

где $k_b(x) = k_s(x)n_0$- максимальная жёсткость связей между берегами трещины в концевой области.

Рассмотрим прямолинейную трещину длины 2ℓ, расположенную на границе соединения двух полуплоскостей из различных материалов (рис. 1). На удаленной границе области приложены равномерно распределенные нормальные к плоскости трещины напряжения σ_0. Выделим части трещины длины $d_1 = d_2 = d$ (концевые области трещины, одинаковые при растяжении, примыкающие к её вершинам, в которых берега трещины

взаимодействуют. Жесткость связей и размер области взаимодействия $d = d(t)$ являются, ввиду формирования связей, возрастающими функциями времени.

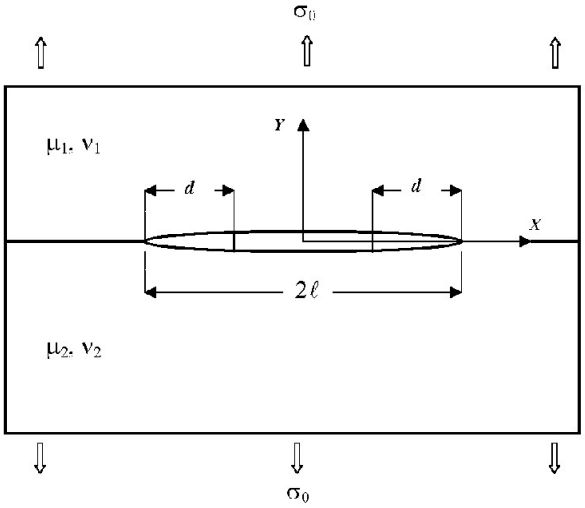


Рис. 1. Трещина на границе соединения материалов

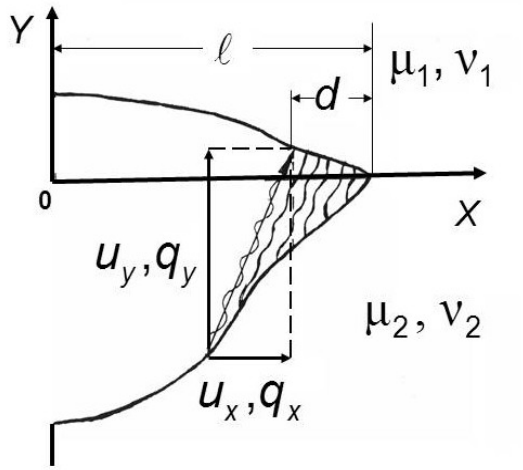


Рис. 2. Связи между поверхностями трещины в концевой области

Возрастание жесткости связей (уменьшение их податливости) во времени приводит к уменьшению раскрытия трещины (смыканию поверхностей трещины). Компоненты раскрытия трещины определяются численно при заданной внешней нагрузке σ_0 и известном законе деформирования связей. Полагая, что усилия в связях изменяются с течением времени квазистатическим образом, коэффициенты интенсивности напряжений K_I, K_{II} для трещины на границе соединения материалов определяются как для статической задачи [1]

$$K_B = \sqrt{K_I^2 + K_{II}^2}, \quad K_{I,II} = K_{I,II}^{ext} - K_{I,II}^{int} \tag{4}$$

где, K_B- модуль коэффициентов интенсивности напряжений (КИН), $K_{I,II}^{ext}$ и $K_{I,II}^{int}$ - КИН от действия внешних напряжений и от действия напряжений, приложенных к берегам трещины в концевой области.

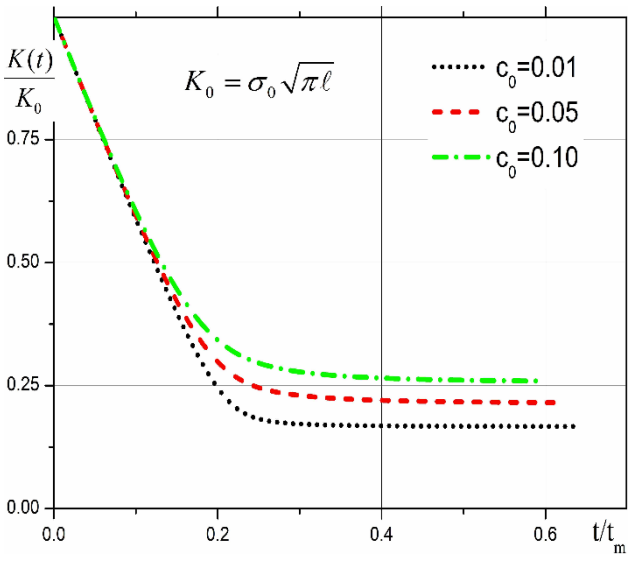


Рис. 3. Зависимость модуля КИН от времени при формировании связей, $d = \ell$

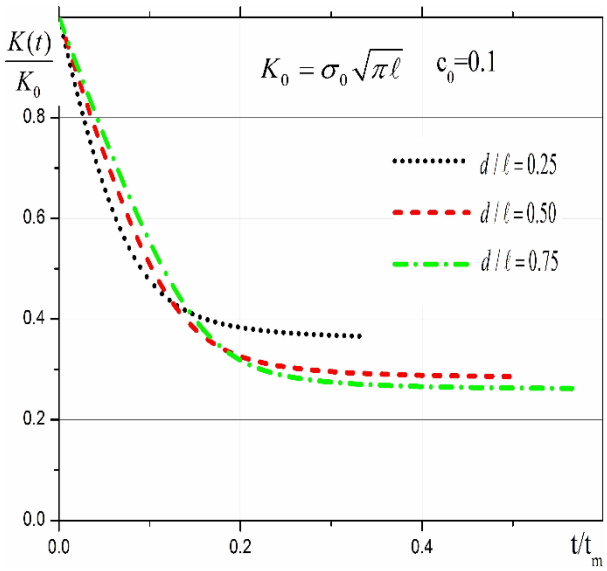


Рис. 4. Зависимость модуля КИН от времени при различной глубине заполнения трещины связями

Рассмотрим пример процесса формирования связей между поверхностями трещины. Полагаем, что а) поверхности трещины свободны от связей полностью или частично; б) между поверхностями трещины, расположенной на границе различных материалов, соединенных слоем адгезива с функцией самовосстановления [3], активизируется процесс самозалечивания. Расчёты выполнены для состояния плоской деформации для соединения нержавеющая сталь-полимер: $E_1 = 200$ ГПа, $E_2 = 25$ ГПа, $E_b = E_2$; $\nu_1 = \nu_2 = 0.30$. Размер залечиваемой трещины - $2\ell = 10^{-3}$м, нагрузка $\sigma_0 = 10$ МПа. Параметры кинетического процесса [4]: энергия активации восстановления связей $U_h = 100$ кДж/моль, $\tau_0 = 10^{-10}$с, максимальная плотность связей $n_0 = 10^{18}$м$^{-2}$, $T = 300\ K$. Предельное значение плотности восстановленных связей принималось равным $N_{cr} = 0.95n_0$. Вычисления заканчиваются при выполнении условия формирования концевой области трещины (критерия самозалечивания) – достижения предельного значения плотности восстановленных связей N_{cr}.

Продолжительность процесса самозалечивания характеризуется безразмерным параметром t/t_m, где t - время формирования концевой области трещины, $t_m = A(T)/N_{st}$, здесь $N_{st} = 499$- максимально допустимое число шагов по времени при численном решении. Эффективность процесса самозалечивания характеризуется снижением модуля КИН при возрастании жёсткости связей и увеличении размера концевой области трещины. В первой серии расчётов полагалось, что восстановление связей происходит вдоль всей трещины ($d = \ell$), первоначально свободной от связей. Зависимость модуля КИН (4) от времени представлена на рис. 3 для различных значений относительной податливости связей $c_0 = H/\ell$ (H– линейный размер, пропорциональный толщине зоны неоднородности на участке соединения материалов), сформированных в трещине после окончания процесса самозалечивания. На первом этапе формирования концевой области модуль коэффициентов интенсивности напряжений убывает практически линейно, а при $(t/t_m) \geq 0.3$ этот параметр изменяется слабо. Результаты, приведенные на рис.4, получены для относительной податливости связей после окончания процесса самозалечивания $c_0 = 0.1$ и вариации размера концевой области трещины, формируемой в процессе самозалечивания. Эффективность самозалечивания для концевой области, занимающей четверть длины трещины, сопоставима с эффективностью этого процесса при большем заполнении трещины,$(d/\ell) = 0.5;\ 0.75$.

Предложенная модель позволяет выполнять исследование физических процессов самозалечивания трещин в рамках подхода, основанного на объединении кинетической термофлуктуационной теории разрушения и модели концевой области трещины. Кинетическая теория формирования связей и модель концевой зоны трещины объединены в численном алгоритме и реализованы в форме вычислительной программы.

Литература

1. М.Н. Перельмутер. Моделирование кинетики самозалечивания трещин. Физическая мезомеханика, 2019, 22(4) 47–55.
2. A. Khawam, D.R. Flanagan. Solid-state kinetic models: Basics and mathematical fundamentals.The Journal of Physical Chemistry, 2006, B110 17315–17328
3. M.D. Banea, L.F.M. da Silva, R.D. Campilho, C. Sato. Smart Adhesive Joints: An Overview of Recent Developments. The Journal of Adhesion, 2014, 90 16-40.
4. В.Г. Регель, А.И. Слуцкер, Э.Е. Томашевский. Кинетическая природа прочности твердых тел. М.: Наука. 1974. 560 с.

РАЗРАБОТКА АМОРФНО-КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ КОМПОЗИТОВ С УСОВЕРШЕНСТВОВАННЫМИ СВОЙСТВАМИ НА БАЗЕ ЛЕНТОЧНЫХ АМОРФНЫХ СПЛАВОВ

И.Е. Пермякова

Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, Москва
inga_perm@mail.ru

Аморфные сплавы (АС), в которых присутствует лишь ближний порядок в расположении атомов, благодаря необычному комплексу свойств находят широкое применение в качестве материала для создания противокражных меток, датчиков деформации и давления, биосовместимых имплантов, сердечников трансформаторов, фильтров для работы в кислотных растворах, при экранировании магнитных полей, в качестве компонент для армирования. Однако остро стоят вопросы, касающиеся их охрупчивания, ограниченной термической устойчивости, отсутствия деформационного упрочнения из-за распространения сильнолокализованных полос сдвига, лимитов по геометрическим параметрам лент, полученных спиннингованием. Применяя перспективные виды обработок, можно успешно совершенствовать уровень свойств АС, модифицируя структуру как в пределах аморфного, так и нанокристаллического состояния [1-4].

В работе рассматриваются возможности альтернативных способов получения многообразия аморфно-нанокристаллических композитов (АНК) с высоким уровнем эксплуатационных свойств. Будет уделено внимание:

– отжигу в определенных температурно-временных интервалах и обработке ультразвуком, способствующих созданию естественных АНК, представляющих собой аморфную матрицу с оптимально распределенными по объемной доле и размеру нанокристаллами;
– лазерному облучению короткими импульсами, позволяющему комбинировать аморфную и кристаллическую структуры по сечению АС, формировать градиентные структуры, функционирующие с соответствующей реакцией на изменение внешних условий;
– кручению под высоким квазигидростатическим давлением при заданных степенях интенсивной пластической деформации, позволяющему создавать гибридные слоистые АНК из различных по химическому составу и свойствам АС.

Обсуждаются режимы экстремальных внешних воздействий на АС, приводящие к наилучшему сочетанию механических характеристик (материаловедческому балансу пластичности и прочности), магнитомягких параметров (низкая коэрцитивная сила, высокие магнитная проницаемость, индукция насыщения, удельная намагниченность насыщения) и стойкости к коррозии, полученных АНК.

Работа выполнена в рамках Государственного задания № 075-00320-26-00.

Литература

1. И.Е. Пермякова, Е.В. Дюжева-Мальцева. Перспективные технологии для оптимизации свойств аморфных и аморфно-нанокристаллических сплавов. В кн.: «Перспективные материалы и технологии». в 2 т., под ред. В.В. Рубаника. Минск: БГУИР, 2026. Т. 1. Гл. 19. С. 301-318.
2. А.М. Глезер, И.Е. Пермякова. Нанокристаллы, закаленные из расплава. М.: Физматлит, 2012. 360 с.
3. И.Е. Пермякова, Е.В. Дюжева-Мальцева. Влияние ультразвуковой обработки на структурные превращения и механическое поведение аморфных сплавов (ОБЗОР). Frontier Materials & Technologies, 2025, (2) 53-71.
4. И.Е. Пермякова, А.А. Иванов, И.Н. Лукина, М.В. Костина, Е.В. Дюжева-Мальцева. Инженерия поверхности аморфного сплава $Fe_{53,3}Ni_{26,5}B_{20,2}$ эксимерным лазером. Известия ВУЗов. Черная металлургия, 2025, 68(6) 598-606.

ПРЯМОЛИНЕЙНЫЕ ДИСЛОКАЦИИ НЕСООТВЕТСТВИЯ В СЕГМЕНТИРОВАННЫХ НАНОПРОВОЛОКАХ

Д.А. Петров[1], М.Ю. Гуткин[1, 2, 3], А.Л. Колесникова[1, 2], А.Е. Романов[2]

[1]*Институт проблем машиноведения РАН, С.-Петербург*
[2]*Университет ИТМО, С.-Петербург*
[3]*Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого*
petrov_d_a@ipme.ru

Сегментированные нанопроволоки (СНП) – это квазиодномерные наногетеростуктуры, в которых фазы разделяются межфазными границами поперек оси СНП (рис. 1а) [1]. Как и другие типы наноструктур, СНП вызывают интерес в связи с их уникальными функциональными свойствами, обусловленными квантово-размерными эффектами. При этом комбинирование различных материалов в одной наносистеме существенно расширяет возможности управления этими свойствами, однако неизбежно привносит в систему механические остаточные напряжения – напряжения несоответствия, вызванные разницей в постоянных кристаллических решеток составляющих СНП фаз. При определенных условиях напряжения несоответствия могут релаксировать за счет образования различных дефектов несоответствия и нарушения когерентности межфазных границ. Поскольку эти процессы негативно сказывается на функциональных свойствах наносистем, одной из ключевых проблем при создании неоднородных СНП является образование дислокаций несоответствия (ДН) в ходе такой релаксации [2,3].

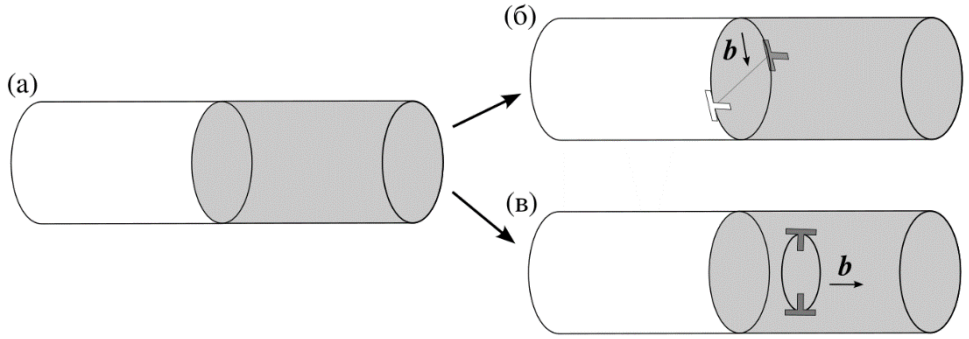


Рис. 1. Участок СНП с границей в исходном когерентном состоянии (а) и в частично релаксированных состояниях с прямолинейной краевой ДН на границе (б) или с круговой призматической дислокационной петлей, параллельной границе (в).

Построение теоретических моделей релаксации напряжений несоответствия имеет большую практическую ценность. В частности, определенные из теории критические параметры релаксации могут служить ориентирами при планировании эксперимента или при проектировании приборов на основе СНП. В настоящей работе аналитически определяются критические параметры появления первой прямолинейной краевой ДН на межфазной границе СНП (рис. 1б). Для этого используются классическая линейная теория упругости и энергетический критерий образования ДН. Подобный подход уже применялся ранее для СНП (см. обзор [3] и работу [4]). Однако ключевым (но не единственным) отличием ранних работ [3] является использование метода конечных элементов для расчета упругой энергии системы. Авторы [4] аналитически исследовали другой механизм релаксации путем формирования вблизи границы круговой призматической дислокационной петли, соосной СНП (рис. 1в). Учитывая то, что в реальных СНП обычно наблюдаются прямолинейные ДН [2,3], полезно рассмотреть случай прямолинейной краевой ДН и сравнить теоретические значения критических параметров для разных механизмов релаксации.

Критические параметры определяются из условия

$$\Delta W = W^{\text{disl}} + W^{\text{int}} = 0, \quad (1)$$

где ΔW – изменение энергии системы при образовании ДН, W^{disl} – собственная энергия ДН, W^{int} – энергия ее взаимодействия с полем напряжений несоответствия. Аналитического решения задачи о прямолинейной дислокации, пересекающей цилиндр, пока не существует. Поэтому для расчета W^{disl} использовался метод оценки упругой энергии [5], который дает:

$$W^{\text{disl}} = \frac{Gb^2 R_0}{2\pi(1-\nu)}\left(\ln\frac{\alpha R_0}{b} - C + \frac{1}{4(1-\nu)}\right), \quad (2)$$

где G – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона, R_0 – радиус СНП, b – величина вектора Бюргерса ДН, α – параметр энергии дислокационного ядра (например, для металлов $\alpha = e$ – основание натурального логарифма [6]) и $C \approx 0.93$. Далее, используя выражения для напряжений несоответствия, представленные в [7], энергию взаимодействия W^{int} рассчитали как работу этих напряжений при зарождении ДН, откуда

$$W^{\text{int}} = -\frac{GbfR_0^2 h(\nu)}{2\pi(1-\nu)}, \quad (3)$$

$$h(\nu) = 8(1+\nu)\int_0^{\infty} \frac{\beta^2 I_0^2 - \beta^2 I_1^2 + \beta I_0 I_1 - \beta I_0 U - I_1 U}{\beta^2\left(\beta^2 I_0^2 - \beta^2 I_1^2 - 2(1-\nu) I_1^2\right)} d\beta \approx 2.7 + 1.3\nu, \quad (4)$$

$$U(\beta) = \int_0^{\beta} I_0(\tilde{\beta}) d\tilde{\beta}, \quad (5)$$

где $f = 2(a_2 - a_1)/(a_2 + a_1)$ – параметр несоответствия решеток, I_0 и I_1 – модифицированные функции Бесселя 0-го и 1-го порядка соответственно.

Из формул (1)–(3) можно получить в явном виде критическое несоответствие:

$$f_c = \frac{b}{R_0 h(\nu)}\left(\ln\frac{\alpha R_0}{b} - C + \frac{1}{4(1-\nu)}\right). \quad (6)$$

На рис. 2 представлены значения f_c в зависимости от радиуса СНП R_0. Для сравнения здесь также приведены значения критического несоответствия образования круговой призматической дислокационной петли $f_c \approx (b/R_0)^{-0.77}$[4], которые оказались значительно выше, чем для прямолинейной ДН, что делает зарождение петли менее предпочтительным.

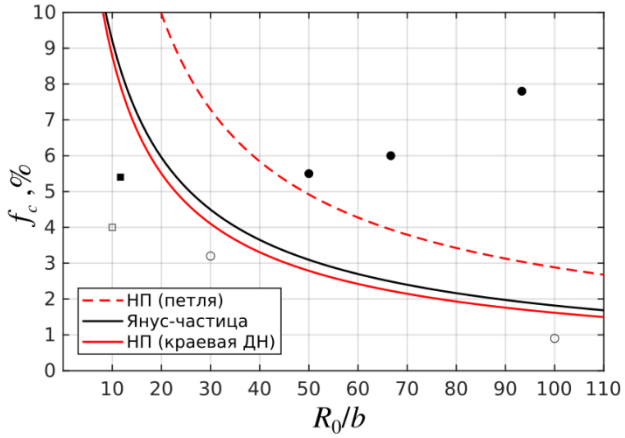


Рис. 2. Значения критического несоответствия f_c в зависимости от радиуса СНП R_0. Круги соответствуют реальным СНП и наностержням (данные взяты из обзора [3]), а квадраты – гетеродимерам [9,10]. Закрашенные значки соответствуют наблюдениям ДН, а незакрашенные – бездислокационным СНП.

Как видно из рис. 2, значения f_c для прямолинейных ДН в СНП достаточно высоки и, что интересно, очень близки к значениям для прямолинейных ДН в сферических Янус-частицах [8] (рис. 3а). Таким образом, можно ожидать, что в «промежуточных» системах,

таких как наногетеродимеры или сегментированные наностержни (рис. 3б,в), значения критических параметров окажутся близки к полученным для СНП (рис. 3г). Это делает более доступным применение теоретических результатов к широкому классу наносистем. На рис. 2 также приведены экспериментальные точки для некоторых реальных наногетеросистем, демонстрирующие хорошее соответствие результатов предложенной модели имеющимся опытным данным. Однако для дальнейшей верификации упругого подхода необходимо обобщить модель на случай квантовых дисков в НП, а также на случай СНП с размытыми границами. Разработке таких моделей будут посвящены дальнейшие исследования авторов.

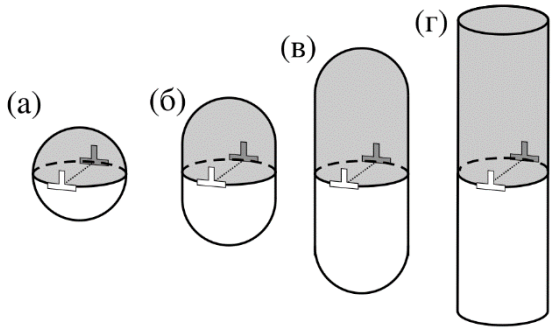


Рис. 3. Модели наногетеросистем в частично релаксированном состоянии: а) Янус-частица, б) гетеродимер, в) сегментированный наностержень, г) сегментированная нанопроволока.

Статья подготовлена в рамках выполнения государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации по теме НИР 124041100008-5 для ИПМаш РАН.

Литература

1. C. Jia, Z. Lin, Y. Huang, X. Duan. Nanowire electronics: from nanoscale to macroscale. Chem. Rev., 2019, 119(15), 9074-9135.
2. K.L. Kavanagh. Misfit dislocations in nanowire heterostructures. Semicond. Sci. Technol., 2010, 25(2), 024006.
3. F. Glas. Strain in nanowires and nanowire heterostructures. Semicond. Semimet., 2015, 93, 79-123.
4. A.L. Kolesnikova, A.P. Chernakov, M.Y. Gutkin, A.E. Romanov. Misfit strain induced out-of-interface prismatic dislocation loops in axially inhomogeneous hybrid nanowires. Extreme Mech. Lett., 2022, 56, 101861.
5. Д.А. Петров, М.Ю. Гуткин, С.А. Красницкий, А.Л. Колесникова, А.Е. Романов. Оценка критических параметров релаксации напряжений несоответствия в наноструктурах. Актуальные проблемы прочности : Сборник тезисов LXIX Международной конференции памяти академика В.М. Счастливцева, Екатеринбург, 15–19 июня 2026 года. Екатеринбург: Уральский государственный горный университет, 2026. С. 112-114.
6. Дж. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 600 с.
7. A.E. Romanov, A.L. Kolesnikova, M.Yu. Gutkin. Elasticity of a cylinder with axially varying dilatational eigenstrain. Int. J. Solids Struct., 2021, 213, 121-134.
8. Д.А. Петров, М.Ю. Гуткин, А.Л. Колесникова, А.Е. Романов. Критические условия образования прямолинейных дислокаций несоответствия в композитных наночастицах. Актуальные проблемы прочности (АПП-2023) : Материалы LXVI Международной конференции, Зеленогорск, Санкт-Петербург, 23–27 сентября 2023 года. Санкт-Петербург: ООО "Издательство ВВМ", 2023. С. 27.
9. T. Pellegrino et al. Heterodimers based on $CoPt_3$−Au nanocrystals with tunable domain size. J. Am. Chem. Soc., 2006. 128(20), 6690-6698.
10. A. Figuerola et al. One-pot synthesis and characterization of size-controlled bimagnetic FePt− Iron oxide heterodimer nanocrystals. J. Am. Chem. Soc., 2008, 130(4), 1477-1487.

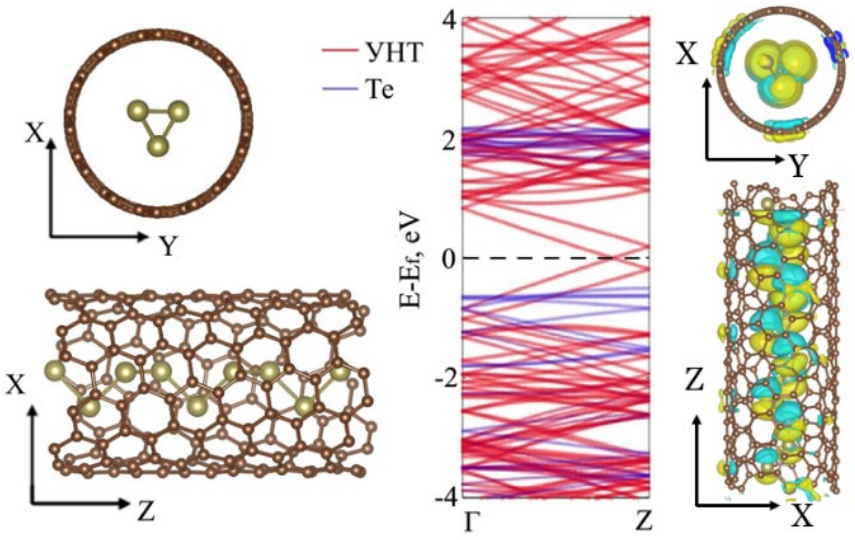
МОДЕЛИРОВАНИЕ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ И ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК, ЗАПОЛНЕННЫХ СТЕРЖНЕВЫМИ СТРУКТУРАМИ ТЕЛЛУРА

С.С. Петрова, Д.Г. Квашнин

Институт биохимической физики имени Н.М. Эмануэля РАН, Москва
c.belim@yandex.ru

Углеродные нанотрубки (УНТ) представляют интерес для современных нанотехнологий благодаря уникальным электронным свойствам и возможности управлять ими, изменяя атомную структуру или внедряя другие материалы в полое пространство нанотрубок. Особую перспективу открывает создание гибридных структур на основе заполненных УНТ для различных функциональных применений – в частности, в гибкой электронике, адресной доставке лекарств, композитных материалах и высокочувствительных газовых сенсорах [1-5].

В последние годы активно исследуются УНТ, заполненные кристаллами со стержневой геометрией, такими как сера и селен, которые при инкапсуляции в нанотрубки формируют спиральные структуры [6]. В рамках данного исследования рассматривается теллур – элемент со схожим стержневым строением, квантово-химические исследования которого в области сенсорики и фотоники только начали проводиться [7]. В работе представлены первые шаги в исследовании особенностей физико-химических свойств на границе раздела между УНТ и стержневой структурой Te. В ходе работы были проведены моделирование и оценка стабильности структур, состоящих из одностенных углеродных нанотрубок разных диаметров (8 – 11 Å) и индексов хиральности с размещенными внутри стержнями теллура. Пример гибридной структуры приведен на рисунке 1а. Предполагается, что наличие стержневой структуры приведёт к изменению электронной плотности и химической активности поверхности УНТ, что увеличит чувствительность к опасным летучим соединениям.



а б в

Рис. 1. Гибридная структура Te@УНТ с хиральностью нанотрубки (8.5) (а) оптимизированная структура Te@УНТ в плоскостях: (x, y); (x, z) (б) зависимость энергии от волнового вектора (в) самосогласованная плотность заряда в точках трехмерной сетки

Расчеты проводились с использованием метода DFT в программном комплексе SIESTA [8]. На основе анализа зонных структур была проведена оценка влияния стержней Te

на электронную структуру УНТ (рис. 1б). Результаты показали изменение плотности электронного состояния, при включении стержней Te внутрь одностенных УНТ (рис. 1в). В полупроводниковых УНТ при включении стержней теллура наблюдалось уменьшение ширины запрещённой зоны.

Анализ результатов расчета краевых потенциалов валентных и проводящих зон показал, что гибридные структуры Te@УНТ имеют электронный тип проводимости, что может быть использовано для детектирования восстановительных газов. Рассчитанные работы выхода для гибридных структур с теллуром показали наименьшее значение, по сравнению с другими гибридными структурами на основе УНТ (табл. 1).

Таблица 1. Результаты расчета работы выхода гибридных структур

Соединение	n-Te@УНТ (8,5)	n-Te@УНТ (11,0)	УНТ (8,5)	Si@ УНТ (11,0)	B@ УНТ (11,0)	O@ УНТ (11,0)	S@ УНТ (11,0)	O-УНТ (11,0)
W, eV	3,15	3,42	3,43	3,50	3,56	3,72	3,78	4,7

Полученные результаты демонстрируют потенциал гибридных структур Te@УНТ в качестве чувствительных элементов сенсорных устройств, где изменение электронной структуры под воздействием внедряемого компонента может повлиять на поверхностную активность материала и улучшить адсорбцию газов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ (грант № 25-73-10250, https://rscf.ru/project/25-73-10250/)

Литература

1. F. Shayeganfar, J. Beheshtian, R. Shahsavari. First Principles Study of Water Nanotubes Captured Inside Carbon/Boron Nitride Nanotubes. Langmuir, 2018.
2. C. Allard, L. Alvarez, et.al. Advanced 1D heterostructures based on nanotube templates and molecules. Chem. Soc. Rev., 2024, 53(16), 8457-8512.
3. A.A. Vorfolomeeva, A.V. Okotrub, et.al. Synergistic effect of sidewall holes and encapsulated phosphorus to improve lithium storage in single-walled carbon nanotubes. J. Mater. Chem. A., 2025, 13, 4634-4649.
4. A.N. Khlobystov. Carbon Nanotubes: From Nano Test Tube to Nano-Reactor. ACS Nano, 2011, 5(12), 9306 –9312.
5. D. Yadav Manishkumar, M. Joshi Hrushikesh, et.al. Advances in the application of carbon nanotubes as catalyst support for hydrogenation reactions. Chem. Eng. Sci., 2023, 272-118586.
6. I. Mikhailov, et.al. Quantum chemical study of the influence of torsional deformation on the properties of chiral WXY (X, Y = S, Se) Janus-nanotubes. 2024, arXiv: 2411.00185.
7. V. Porsev, A.V. Bandura, R.A. Evarestov. Line group approach for quantum chemical study of intrinsic helical twist of ultrathin tellurium nanorods. CrystEng Com., 2024, 26: 3410.
8. http://iopscience.iop.org/0953-8984/14/11/302/

ПРОЕКТИРОВАНИЕ ТПМП-СТРУКТУР С ЗАДАННЫМ НА ОСНОВЕ РЕФЕРЕНТНОЙ МОДЕЛИ МЕХАНИЧЕСКИМ ОТКЛИКОМ

Ю.В. Пирогова, Н.В. Еленская, В.М. Затонская, М.А. Ташкинов

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь
yu.pirogova@pstu.ru

Развитие инструментов проектирования привело к появлению материалов с программируемым механическим откликом. Управление внутренней архитектурой таких материалов позволяет целенаправленно изменять их эффективные свойства и формировать широкий спектр функциональных характеристик, которые потенциально расширяют диапазон применения таких материалов от промышленных до биомедицинских приложений. Одним из таких классов материалов являются структуры на основе трижды периодических минимальных поверхностей (ТПМП) [1]. Высокая чувствительность механических характеристик ТПМП к изменению параметров внутренней архитектуры привела к активному развитию методов их оптимального проектирования. Большинство существующих методов оптимизации основано на согласовании эффективных характеристик, таких как модуль упругости или пористость. Однако конструкции с близкими интегральными свойствами могут существенно различаться по напряжённому состоянию и механизмам перераспределения нагрузки. Использование распределения напряжений в качестве целевой характеристики позволяет учитывать не только общий уровень механического отклика, но и характер передачи нагрузки между элементами структуры [2]. Такой подход позволяет учитывать особенности локального напряженно-деформированного состояния и рассматривать структуры на основе ТПМП в качестве механически программируемых материалов.

В связи с этим, целью данной работы является исследование возможности оптимизации механического отклика ТПМП за счет управления внутренней архитектурой ячейки. В качестве частного случая рассматривается задача проектирования скаффолдов для тканевой инженерии, механическое поведение которых приближено к референтной модели костной ткани. Решена задача оптимизации, где в качестве целевой функции выбрана абсолютная разница между распределением напряжений в референтном фрагменте костной ткани и в проектируемом скаффолде (Рис. 1, а), а в качестве параметров управления выбраны внутренние параметры ТПМП, регулирующие эффективную пористость, средний диаметр поровых каналов скаффолда и его механический отклик. Исследованы структуры на основе поверхностей Шоена G (тип G), Шварца D (тип D) и Фишера-Коха S (тип F) (Рис. 1, в-д). В качестве ограничений оптимизационной задачи выбраны морфометрические параметры проектируемого скаффолда, которые напрямую влияют на его будущие биологические свойства. В рамках данного исследования для управления механико-морфометрическими характеристиками структуры ТПМП в качестве параметров управления были выбраны следующие параметры: доля элементарных ячеек n, углы пространственной ориентации элементарной ячейки θ_x, θ_y и параметр эффективной пористости модели t.

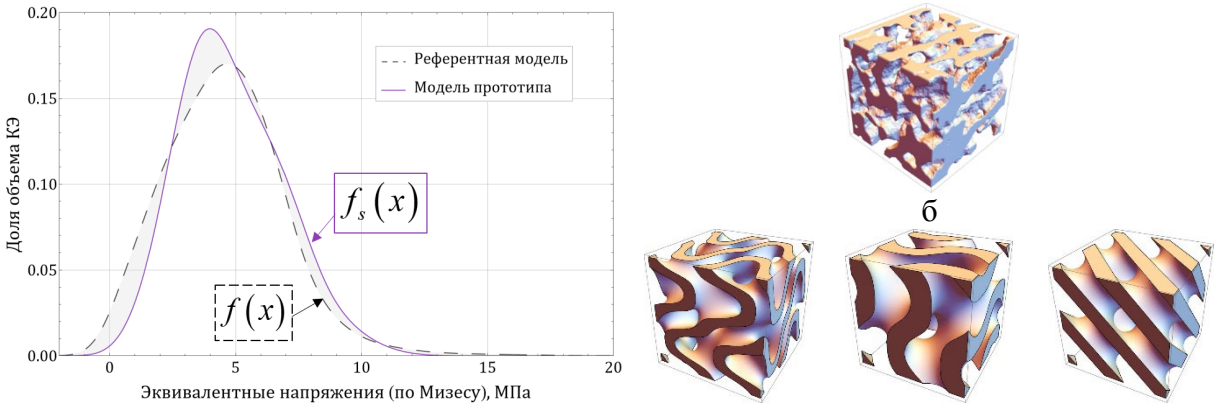


Рис. 1. Распределение напряжений в исследуемых структурах (а). Референтный фрагмент трабекулярной костной ткани (б) и примеры исследуемых структур на основе ячеек типа G (в), D (г) и F (д)

Решение задачи оптимизации получено с использованием генетического алгоритма. Основная идея алгоритма состоит в формализации процедуры естественного отбора при помощи многократного применения последовательности операторов выборки, селекции, кроссовера и мутации. На первом шаге происходит генерация начальной популяции. Построение целевой функции происходит на основе данных, полученных для сформулированной математической модели с применением метода конечных элементов. Оценка целевой функции производится с применением метрики Вассерштейна. После ее оценки применяется селекция случайного типа. Далее из отобранных особей формируется новое поколение с помощью имитированного бинарного кроссовера. В заключение применяется полиномиальная мутация. В ходе предварительно проведенной оценки сходимости решения были определены следующие параметры: размер популяции – 15 особей, критерием остановки – генерация 5 поколений.

При решении задачи оптимизации с помощью алгоритма для каждого вида ячейки было получено семь вариаций структур. Исследование механического поведения пористых структур проведено с помощью конечно-элементного анализа. Моделям скаффолдов были заданы свойства полилактида (PLA).

Для анализа механического отклика каждой сгенерированной структуры ТПМП были построены графики распределения эквивалентных напряжений. Также рассчитано расстояние полной вариации TVD, которое позволяет количественно оценить различие между двумя распределениями. На основании данного анализа из каждой группы была отобрана структура, демонстрирующая наибольшее сходство механического отклика с откликом референсной модели костной ткани. В группе типа F наиболее близкое расположение к кривой референтной модели имеет распределение напряжений, соответствующее структуре F7, в группе типа G – структура G7 и в группе типа D – структура D3. Все отмеченные структуры воспроизводят характерную асимметрию распределения со спадом в области напряжений 8-15 МПа. На основании расчета параметра TVD, наиболее близкое значение к референтному распределению имеют структуры F1 (5.42%), G7 (5.48%) и D4 (6.67%).

Поскольку одной из ключевых задач при проектировании таких структур является обеспечение требуемого эффективного механического отклика, в рамках настоящего исследования он оценен по эффективному модулю упругости при сжатии. Согласно полученным данным значение эффективной жесткости референтной модели превышает соответствующие значения для всех сгенерированных структур. При этом оценка результатов по каждой группе структур показала очень близкие значения эффективного отклика с незначительным отклонением от среднего (среднее значение составляет ~360 МПа, коэффициент вариации ~ 2-3%). В каждой группе была выделена структура, эффективная

жесткость которой лучше всего соответствует параметру костного фрагмента: в группе F это структура F4 (расхождение 5.78%), в группе G – структура G7 (расхождение 4.43%), в группе D – структура D5 (расхождение 6%). Таким образом, поскольку для лучших структур из каждой группы расхождение не превышает 6%, в рамках поставленной задачи можно говорить о хорошем соответствии эффективной жесткости спроектированных структур.

Несмотря на то, что ключевые требования к архитектуре структуры ТПМП были сформулированы в качестве ограничений на этапе постановки задачи оптимизации, для комплексной оценки сгенерированных структур был проведен анализ параметров средней толщины стенки структуры ТПМП и диаметра ее поровых каналов. Средняя толщина стенки структур проанализирована с учетом ограничений, связанных с предполагаемой технологией производства (для изготовления изделий из полилактида активно используется технология FDM-печати). Ограничения в данном случае связаны с диаметром сопла, минимальная толщина стенки скаффолда не должна быть менее 0.2 мм. Диаметр поровых каналов, удовлетворяющий диапазону от 0.3 до 0.6 мм, обеспечивает качественное выполнение заданных морфометрических ограничений. На этапе постановки задачи оптимизации данное требование было косвенно учтено при расчете допустимого диапазона значений параметров управления. Полученные результаты показывают, что используемый оптимизационный алгоритм в целом обеспечивает формирование ТПМП-структур, удовлетворяющих заданным морфометрическим ограничениям и обладающих требуемыми геометрическими характеристиками.

Таким образом, показано, что управление архитектурными параметрами ТПМП позволяет формировать структуры с заданным механическим откликом и требуемыми морфометрическими характеристиками. Использование распределений напряжений в качестве критерия оптимизации обеспечивает более высокий уровень механического соответствия референтной среде по сравнению с подходами, основанными исключительно на эффективных свойствах материала. С учётом совокупности критериев, включающих сходство распределений напряжений, эффективную жёсткость и морфометрические характеристики, структура G7 является наиболее перспективной для использования в качестве замещения референтного фрагмента костной ткани. Результаты работы подтверждают перспективность применения генетических алгоритмов для решения многопараметрических задач проектирования ТПМП-структур и показывает, что предложенный подход может быть использован для разработки функционально адаптированных пористых материалов с управляемым сочетанием механических и морфометрических свойств.

Результаты получены при выполнении государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации на выполнение фундаментальных научных исследований (проект FSNM-2024-0013).

Литература

1. Y. Pirogova, M. Tashkinov, I. Vindokurov, N. Elenskaya, A. Tarasova, A. Shalimov, V. V Silberschmidt Design of lattice structures for trabecular-bone scaffolds: comparative analysis of morphology and compressive mechanical behaviour. Biomechanics and Modeling in Mechanobiology., 2025, 24(5) 1535-1564.
2. M. Tashkinov Multipoint stochastic approach to localization of microscale elastic behavior of random heterogeneous media. Computers & Structures, 2021, 249.

ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ЭКВИАТОМНОГО СПЛАВА CU-50AT.%AU ПРИ УПОРЯДОЧЕНИИ В ПОЛЕ ВНЕШНИХ СИЛ

П.О. Подгорбунская[1, 2], А. Ю. Волков[1]

[1]*Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН, Екатеринбург*
[2]*Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург*
Polina.Podgorbunskaya@yandex.ru

Традиционные методы упрочнения сплавов системы Cu–Au в значительной степени изучены и апробированы, что ограничивает возможности дальнейшего повышения их функциональных свойств и требует разработки принципиально новых подходов. Одним из перспективных и практически неизученным подходом является управление формированием атомно-упорядоченной структуры путем приложения внешних сил в ходе термообработок. Приложение сжимающих или растягивающих напряжений в процессе фазового превращения беспорядок → порядок может существенно изменить структуру и свойства материала. В связи с этим целью данного исследования является изучение структуры и свойств проволочных образцов эквиатомного сплава Cu-50Au, подвергнутых атомному упорядочению в поле внешних сил.

Эксперименты проводились на образцах эквиатомного сплава Cu-50Au. Упорядоченное состояние получали с помощью медленного, со скоростью 12 град/час охлаждения от температуры 500°C. В процессе термообработки к проволочным образцам прикладывались внешние сжимающие и растягивающие нагрузки различной величины (до 40 МПа). Формирование структуры и свойств сравнивалось с образцом, упорядоченным в свободном состоянии. Для проведения этих экспериментов были сконструированы миниатюрные захваты, которые вместе с образцом и силовой пружиной помещались в кварцевую трубу. В процессе исследования проводилось изучение структуры и свойств полученных образцов, включающее: рентгеноструктурный анализ (РСА), дилатометрические измерения, механические испытания на растяжение и резистометрическое исследование. Также была проведена математическая обработка температурных производных электросопротивления при нагреве образцов.

На основе РСА-результатов установлено, что при отжиге в поле сжимающих напряжений короткие *c*-оси тетрагональной $L1_0$-сверхрешетки выстраиваются вдоль направления действия силы. В свою очередь, отжиг под растяжением формирует текстуру, в которой *c*-оси залегают в плоскости поперечного сечения образца [1]. Из механических испытаний на растяжение было выявлено, что приложение сжимающей нагрузки в процессе атомного упорядочения несколько повышает прочностные свойства сплава. В свою очередь, упорядочение под растяжением значительно увеличивает пластичность образцов. Анализ температурных производных показал, что упорядочение в поле внешних сил повышает температуру фазового превращения порядок→беспорядок и влияет на температурную стабильность фаз CuAuI и CuAuII [2]. Выявлено, что в ходе атомного упорядочения под растяжением 40 МПа наблюдается эффект ползучести (длина образца увеличивается на 15,6%), происходит уменьшение степени дальнего атомного порядка, увеличивается уровень микронапряжений и повышается удельное электросопротивление.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России для ИФМ УрО РАН и молодежного проекта № 07–25.

Литература

1 А.Ю. Волков, П.О. Подгорбунская, А.М. Пацелов, В.А. Казанцев, О.С. Новикова, А.А. Гаврилова. Особенности структуры и свойств эквиатомного сплава Cu-Au, упорядоченного в поле внешних сил. Физическая мезомеханика., 2025, 28, 55–69.

2 П.О. Подгорбунская, В.А. Казанцев, А.М. Пацелов, А.Ю. Волков. Структура и свойства эквиатомного сплава CuAu, упорядоченного под растягивающим напряжением 40 МПа. Frontier Materials & Technologies., 2025, 4, 69–78.

ИЗМЕНЕНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ СПЛАВА 20Au-15Pt-15Pd-50Cu (ат.%) В ХОДЕ ОТЖИГА ПРИ 200-600 °С

П.О. Подгорбунская, О.С. Новикова, М.Ю. Краев, А.Ю. Волков

ИФМ УрО РАН, Екатеринбург
polina.podgorbunskaya@yandex.ru

Сплавы на основе золота, платины и палладия давно используются как проводники слабых электрических сигналов [1], поэтому проблема повышения их прочностных свойств всегда актуальна. В настоящее время многокомпонентные сплавы привлекают все большее внимание, благодаря уникальному сочетанию свойств. Представляет интерес использовать многокомпонентность для создания высокопрочного сплава AuPtPdCu. Состав сплава выбран из тех соображений, что соотношение компонентов: 50(AuPtPd) - 50Cu (ат.%) позволят сформировать в нем атомно-упорядоченное состояние. В таком состоянии сплав может иметь пониженное удельное электросопротивление, что может расширить его функциональность.

Целью настоящей работы является изучение влияния различных исходных состояний и отжигов на структуру и свойства сплава 20Au-15Pt-15Pd-50Cu (ат.%).

Были исследованы образцы, находящиеся в двух исходных состояниях: закаленном от 850°С и деформированном на 75% изменения площади поперечного сечения. Для изучения процессов перестройки структуры и эволюции свойств проводились отжиги в интервале температур от 200 до 600 °С (с шагом в 100 °С) с последующим охлаждением на воздухе. Продолжительность термообработок составляла от 1 ч до 168 ч (7 суток). Образцы исследовались с помощью рентгеноструктурного анализа, измерения микротвердости и удельного электросопротивления.

Установлено, что в сплаве 20Au-15Pt-15Pd-50Cu (ат.%) после закалки от 850 °С формируется ближний порядок. Проведенные эксперименты указывают на то, что скорость фазовых превращений в исследуемом сплаве мала. Пластическая деформация приводит к ускорению процессов упорядочения. После отжига при температурах выше 350 °С наблюдается снижение удельного электросопротивления, причем в исходно деформированном сплаве этот процесс происходит более интенсивно. Результаты рентгеноструктурного анализа указывают на то, что в ходе отжигов в сплаве формируются атомно-упорядоченные фазы со сверхструктурами $L1_0$ и B2. Сложная форма некоторых пиков на дифрактограммах свидетельствует о том, что они являются суперпозицией нескольких отражений.

Микротвердость исходно закаленного сплава существенно повышается после отжига при температуре 200 °С, в сплаве после предварительной деформации - при 400 °С. Максимальное значение микротвердости (4260 МПа) фиксируется после отжига деформированного сплава при температуре 400 °С в течение 168 ч (рост на ~20%). Этому же структурному состоянию соответствует электросопротивление $\rho \approx 34{,}83 \times 10^{-8}$ Ом·м, что на ~20% ниже электросопротивления сплава в исходном состоянии. Сочетание высокой микротвердости и пониженного удельного электросопротивления может представлять интерес для практического использования сплава 20Au-15Pt-15Pd-50Cu (ат.%).

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-22-00629, https://rscf.ru/project/25-22-00629/.

Литература

1. Coutu R.A., Kladitis P.E., Leedy K.D., Crane R.L. Selecting Metal Alloy Electric Contact Materials for MEMS Switches. J. Micromech. Microeng., 2004, 14, 157-164.

СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ, МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И КОРРОЗИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ СПЛАВОВ ZN–AG–CU ПОСЛЕ РКУП

М.В. Поленок[1], Э.Д. Хафизова[1, 2]

[1]*Уфимский Университет Науки и Технологий, Уфа*
[2]*Институт металлургии и материаловедения имени А.А. Байкова Российской академии наук, Москва*
Renaweiwei.179@mail.ru

В настоящее время ведутся активные разработки биодеградируемых стентов на основе цинка, обусловленные его оптимальной скоростью коррозии [1], близкой к темпам ремоделирования сосудистой ткани. Однако механические свойства чистого цинка недостаточны для прямого применения в стентовых конструкциях, что требует существенного повышения комплекса характеристик ($\sigma_{0,2}$ > 200 МПа, $\sigma_в$ > 300 МПа, δ > 15%) [2]. Повышение свойств достигается методами легирования и интенсивной пластической деформации (ИПД), приводящей к измельчению зеренной структуры. Формирование ультрамелкозернистого состояния, наряду с упрочнением, открывает дополнительные возможности: уменьшение размера зерна может активировать механизмы зернограничного скольжения, что способствует повышению пластичности цинковых сплавов [3].

Одним из наиболее результативных методов получения ультрамелкозернистых материалов является равноканальное угловое прессование (РКУП), реализующее схемы интенсивной пластической деформации (ИПД) [4, 5]. Ключевое преимущество РКУП перед альтернативными подходами - возможность масштабирования процесса для производства полуфабрикатов, пригодных для промышленного выпуска медицинских изделий. В связи с этим целью настоящей работы выступает комплексное улучшение механических свойств и достижение гомогенного (равномерного) характера коррозии биорезорбируемого сплава Zn-4%Ag-1%Cu за счет применения РКУП, обеспечивающего формирование устойчивой ультрамелкозернистой структуры.

Установлено, что равноканальное угловое прессование (РКУП) при 150 °C трансформирует исходную крупнозернистую структуру сплава Zn-4%Ag-1%Cu в ультрамелкозернистое состояние со средним размером зерен 1-4 мкм и равномерным распределением дисперсных частиц фазы $AgZn_3$. Сформированная структура обеспечивает значительный прирост прочностных характеристик без потери пластичности: предел текучести достигает 270±10 МПа, предел прочности 340±15 МПа, относительное удлинение 28±2%. Достигнутый комплекс свойств существенно превышает требуемый для стентов, упрочнение обусловлено совместным действием зернограничного, дисперсионного и дислокационного механизмов. Вместе с тем формирование УМЗ-структуры сопровождается повышением скорости коррозии в 1,5 раза вследствие увеличения плотности границ зерен и возникновения микрогальванических пар между матрицей и интерметаллидной фазой $AgZn_3$.

Литература

1. Bowen P. K., Guillory R. J., Shearier E. R., Seitz J.-M., Drelich J., Bocks M., Zhao F., Goldman J. Metallic zinc exhibits optimal biocompatibility for bioabsorbable endovascular stents // Materials Science and Engineering: C. 2015, 56, 467-472. DOI:10.1016/j.msec.2015.07.022.
2. Sikora-Jasinska, M., Mostaed, E., Mostaed, A., Beanland, R., Mantovani, D., & Vedani, M. Fabrication, mechanical properties and in vitro degradation behavior of newly developed ZnAg alloys for degradable implant applications. Mater Sci Eng: C, 2017, 77, 1170-1181.
3. Bowen P.K., Drelich J., Goldman J. Zinc Exhibits Ideal Physiological Corrosion Behavior for Bioabsorbable. Stents. Advanced materials. 2013, 25, 2577–2582.

4. Raab, G. J., Valiev, R. Z., Lowe, T. C., & Zhu, Y. T. Continuous processing of ultrafine grained Al by ECAP–Conform. Mater Sci Eng: A, 2004, 382(1-2), 30-34.
5. Khafizova, E., Fakhretdinova, E., Islamgaliev, R., Polenok, M., Sitdikov, V., & Yilmazer, H. Effect of plastic deformation on the structure and mechanical properties of the Zn-4Ag-1Cu zinc alloy. materials, 2023, 16(13), 4646.

МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ НИКЕЛЯ С КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ, АМОРФНОЙ И НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРАМИ: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Г.М. Полетаев

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, Барнаул
gmpoletaev@mail.ru

Металлические наночастицы обладают уникальным комплексом физических, химических и оптических свойств, что делает их перспективными для таких областей, как микроэлектроника, оптоэлектроника и плазмоника, химический катализ, разработка газовых сенсоров, а также медицина и биология. Металлические наночастицы, кроме того, демонстрируют значительно более высокие механические характеристики по сравнению с их объемными аналогами [1–3], что делает их привлекательными для использования в качестве наполнителя в композиционных материалах и для улучшения трибологических свойств смазочных материалов. Прочность монокристаллических наночастиц при их сжатии может достигать гигантских значений – вплоть до нескольких десятков ГПа [2].

В настоящее время известно, что прочность монокристаллических наночастиц увеличивается при уменьшении их размера – это было показано как экспериментально, так и с помощью компьютерного моделирования [1–3]. Кроме этого, с уменьшением размера наночастиц увеличивается вязкость разрушения – значение деформации, при которой достигается максимальное напряжение в случае наночастиц может достигать 10–20% [1].

Помимо частиц с кристаллической структурой, в настоящее время большой интерес представляют частицы с высоким уровнем беспорядка атомной структуры: аморфной или нанокристаллической структурой. Они имеют высокие значения запасенной энергии, обладают уникальной электронной структурой, а также обладают набором полезных механических свойств. Большинство исследований сжатия наночастиц выполнено для монокристаллических частиц. Настоящая работа посвящена исследованию с помощью молекулярно-динамического моделирования механических свойств круглых наночастиц никеля с кристаллической, аморфной и нанокристаллической структурами при деформации сжатия. Рассматривается влияние на прочность наночастицы и вязкость ее разрушения типа структуры, размера наночастицы, скорости деформирования, температуры, среднего размера зерна в случае нанокристаллической структуры.

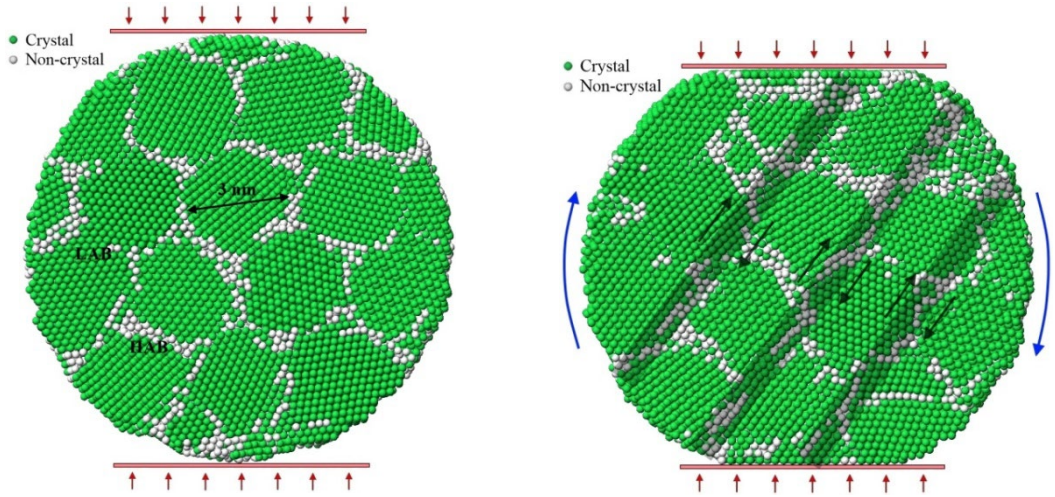
Взаимодействия атомов никеля друг с другом в молекулярно-динамической модели описывались с помощью EAM потенциала из работы [4], где он был создан авторами с учетом экспериментальных данных и результатов *ab initio* расчетов различных свойств никеля. Данный потенциал хорошо зарекомендовал себя при проведении различных молекулярно-динамических исследований и прошел успешную апробацию по широкому спектру механических и структурно-энергетических свойств, включая процессы пластической деформации, структурно-фазовых превращений, самодиффузии [4–7].

Наночастицы с кристаллической и аморфной структурами на первом этапе создавалась путем вырезания шара соответствующего размера из кристалла никеля. Рассматривались частицы диаметром от 1.5 до 20 нм. Вокруг частицы имитировалось свободное пространство. Для контролирования постоянства температуры использовался термостат Нозе-Гувера. Шаг интегрирования по времени в методе молекулярной динамики был равен 2 фс.

Частицы с аморфной структурой создавалась путем сверхбыстрого (со скоростью порядка 10^{16} K/c) охлаждения частиц, расплавленных при нагревании до температуры, значительно превышающей температуру плавления. При охлаждении металла с такой скоростью гомогенная кристаллизация не успевает произойти и образуется аморфная структура, характерная для переохлажденной жидкости [8].

При создании наночастицы с нанокристаллической структурой нанокристаллическая стуктура сначала создавалась в прямоугольной расчетной ячейке никеля, из которой затем вырезалась круглая частица. Размер зерен варьировался от 2 до 8 нм. После вырезания частицы проводилась релаксация структуры в течение 20 пс. После релаксации частица охлаждалась до 0 К.

Одноосное сжатие наночастицы осуществлялось в модели путем движения виртуальных плоскостей по две стороны от частицы с постоянной скоростью (рис. 1а). Взаимодействие атомов с виртуальными границами задавалось как абсолютно упругое. Напряжение при сжатии определялось как отношение суммарной силы, действующей на виртуальные плоские границы со стороны атомов, к суммарной площади контакта.



а) б)

Рис. 1. Пример сечения нанокристаллической частицы диаметром 12 нм со средним размером зерна 2.9 нм в начальный момент времени (а) и при сжатии на 12% (б).

Пластические сдвиги в случае нанокристаллической структуры осуществлялись преимущетсвенно посредством зернограничного проскальзывания (места сдвигов показаны с помощью темных полос, направления сдвигов – черными стрелками). Синими стрелками отмечено направление поворота структуры частицы в процессе деформирования.

При исследовании влияния скорости деформирования и температуры на механические свойства наночастиц было выяснено, что с ростом скорости деформирования максимальное напряжение при сжатии увеличивается, а при повышении температуры уменьшается. Например, при увеличении скорости сжатия монокристаллических частиц диаметром 10 нм на 100 м/с (в диапазоне скоростей от 2 до 500 м/с) прочность повышалась примерно на 8–13% в зависимости от ориентации сжатия. При увеличении температуры на 100 К (в диапазоне от 0 до 1000 К) прочность падала на 3–5%.

При деформации монокристаллических наночастиц имела место анизотропия механических свойств. В частности, прочность при сжатии вдоль направлений [111] и [110] относительно ГЦК кристалла никеля была всегда заметно больше, примерно на 30–40%, прочности при сжатии вдоль [112].

Были выделены следующие этапы деформации монокристаллических наночастиц при сжатии: формирование плоского пятна контакта в местах контакта со сжимающими поверхностями, кооперативный поворот всей структуры частицы, образование вблизи пятен контакта дислокаций и их распространение.

По мере уменьшения размера наночастиц, не только монокристаллических, но и с аморфной и нанокристаллической структурами, их прочность возрастала, а также повышалось значение деформации, при которой достигалось максимальное напряжение. При этом значения прочности для аморфных частиц оказались в несколько раз ниже значений для

монокристаллических частиц. В частности, для монокристаллических частиц диаметром 12 нм прочность составила 15–20 ГПа в зависимости от ориентации сжатия, для нанокристаллической со средним размером зерна 3 нм – 8–10 ГПа, для аморфной – 2–3 ГПа.

При сжатии аморфных наночастиц в большинстве случаев наблюдался феномен уплотнения и частичной кристаллизации структуры вблизи мест приложения нагрузки, который особенно явно проявлялся при достижении деформации, как правило, значений более 8–10%. При дальнейшем сжатии частица обычно кристаллизовалась полностью с образованием нанокристаллической структуры.

Пластическая деформация в наночастицах с нанокристаллической структурой протекала преимущественно за счет зернограничного проскальзывания (рис. 1б). При этом на первом этапе, как правило, происходил поворот всей структуры частицы до достижения максимального значения проекции вектора напряжения на преимущественную плоскость сдвига, которая в случае нанокристаллической структуры определялась взаимной ориентацией границ зерен. Вытянутые примерно вдоль одной плоскости границы зерен представляли в данном случае преимущественную плоскость сдвига.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (FZMM-2026-0005).

Литература

1 J. Amodeo, L. Pizzagalli. Modeling the mechanical properties of nanoparticles: a review. C. R. Phys., 2021, 22, 35-66.
2 A. Sharma, J. Hickman, N. Gazit, E. Rabkin, Y. Mishin. Nickel nanoparticles set a new record of strength. Nat. Commun., 2018, 9, 4102.
3 D. Guo, G. Xie, J. Luo. Mechanical properties of nanoparticles: basics and applications. J. Phys. D Appl. Phys., 2014, 47, 013001.
4. G.P. Purja Pun, Y. Mishin. Development of an interatomic potential for the Ni-Al system. Phil. Mag., 2009, 89, 3245-3267.
5. E.V. Levchenko, T. Ahmed, A.V. Evteev, Composition dependence of diffusion and thermotransport in Ni-Al melts: a step towards molecular dynamics assisted databases. Acta Mater. 2017, 136, 74-89.
6. G.M. Poletaev, I.V. Zorya. Effect of light element impurities on the edge dislocation glide in nickel and silver: molecular dynamics simulation. JETP, 2020, 131(3), 432-436.
7. G.M. Poletaev, Y.V. Bebikhov, A.S. Semenov. Molecular dynamics study of the formation of the nanocrystalline structure in nickel nanoparticles during rapid cooling from the melt. Mater. Chem. Phys., 2023, 309, 128358.
8. A. Tilocca. Cooling rate and size effects on the medium-range structure of multicomponent oxide glasses simulated by molecular dynamics. J. Chem. Phys., 2013, 139, 114501.

ЭВОЛЮЦИЯ МИКРОСТРУКТУРЫ И МИКРОТВЕРДОСТИ МАЛОАКТИВИРУЕМОЙ ФЕРРИТНО-МАРТЕНСИТНОЙ СТАЛИ ЭК-181 ПОСЛЕ КРУЧЕНИЯ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ

Н.А. Полехина, И.Ю. Литовченко

Институт физики прочности и материаловедения им. В.Е. Панина СО РАН, Томск
nap@ispms.ru

Проведены исследования влияния степени деформации при кручении под высоким давлением (КВД) на эволюцию микроструктуры и распределение микротвердости в перспективной малоактивируемой 12 %-ной хромистой жаропрочной ферритно-мартенситной стали ЭК-181 (Fe-12Cr-2W-V-Ta-B). Особое внимание уделено количественной оценке кривизны кристаллической решетки и установлению корреляционных зависимостей между параметрами деформации, структурным состоянием и уровнем локальных внутренних напряжений.

Исходное состояние стали – после традиционной термообработки (ТТО: закалка 1100 °С, 1 ч + отпуск 720 °С, 3 ч). Образцы стали в форме дисков толщиной h = 0.2 мм и диаметром 10 мм деформировали кручением под высоким давлением ~ 8 ГПа на наковальнях Бриджмена при комнатной температуре и числе оборотов N = 1, 3, 5.

После ТТО сталь ЭК-181 характеризуется структурой отпущенного пакетного мартенсита, дисперсно-упрочненного частицами вторых фаз – карбидов $M_{23}C_6$ (M – Cr, Mn, Fe, W, Si) и наноразмерных карбонитридов MX (M – V, Ti, Ta, X – C, N).

После 1 оборота начинается активная фрагментация исходного реечного мартенсита с появлением зерен феррита размером 100-150 нм, формирующих преимущественно субмикрокристаллическую (СМК) структуру. Увеличение числа оборотов до 3 приводит к формированию СМК + НК (нанокристаллической) структуры с медианным размером зерна ≈ 90 нм. Дальнейшая деформация до 5 оборотов приводит к структуре СМК + НК с более высокой долей нанокристаллического компонента и полным исчезновением морфологии исходного реечного мартенсита.

Интенсивная пластическая деформация методом КВД индуцирует значительную трансформацию гетерофазной структуры стали. Размер карбидов $M_{23}C_6$ уменьшается с ≈ 80-100 нм в исходном состоянии до ≈ 20 нм после деформации. Изменяется их пространственное распределение – частицы перераспределяются с границ внутрь зёрен. Карбонитриды MX, присутствовавшие в исходной структуре, после КВД не обнаружены.

Компоненты тензора кривизны кристаллической решётки возрастают с увеличением степени деформации, достигая значений $\chi_{21} \approx 35$ ° мкм$^{-1}$ и $\chi_{31} \approx 19$° мкм$^{-1}$ после 5 оборотов. Сформированные высокодефектные состояния являются источниками локальных внутренних напряжений, величина которых может достигать ~ E/30, где E – модуль Юнга стали.

Микротвердость (H_μ) стали проявляет сильную зависимость от числа оборотов и положения в образце. После 5 оборотов КВД значения H_μ составляют 10.3 ГПа на периферии и 8.2 ГПа на середине радиусе, что в 2-2.4 раза выше исходного уровня (3.4 ГПа). После 3 и 5 оборотов наблюдается тенденция к насыщению микротвердости на краю образцов. Выравнивание распределения микротвердости по радиусу после 5 оборотов указывает на формирование объемного однородного СМК + НК состояния.

Более чем двукратное увеличение микротвердости обусловлено совокупным действием нескольких факторов: измельчением зеренной структуры (вклад зернограничного упрочнения), увеличением плотности дислокаций примерно на порядок (дислокационное упрочнение) и формированием специфических дефектных субструктур с высокой кривизной кристаллической решётки, которые генерируют поля дальнодействующих напряжений и эффективно препятствуют движению дислокаций.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема номер FWRW-2026-0005.

АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ ТОЛЩИНЫ ДИАМАНОВ И БОРНИТРАНОВ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА: МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА

П.В. Полякова, Ю.А. Баимова

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
polina.polyakowa@yandex.ru

Актуальность изучения новых материалов в настоящее время обусловлена необходимостью разработки качественно новых электронных, оптических и наномеханических устройств, а также переходом к инновационным отраслям промышленности. В этом контексте исследование новых двумерных материалов становится особенно важным, так как такие структуры обладают уникальными физическими и механическими свойствами, благодаря своей двумерной природе [1]. Помимо графена, в настоящее время акцент смещается на исследование новых двумерных структур, часть из которых уже получены экспериментально, например, диаман, борнитран [2, 3]. Среди выдающихся свойств диаманов и борнитранов можно отметить высокую электропроводность, прочность, химическую активность. В настоящей работе методом молекулярной динамики исследуется влияние толщины диаманов и борнитранов на их механические свойства.

На рисунке 1 представлена часть ячейки моделирования борнитрана в проекции на плоскость на *xy*. Рассматриваются две стабильные конфигурации диамана и борнитрана: AA (а) и AB (б).

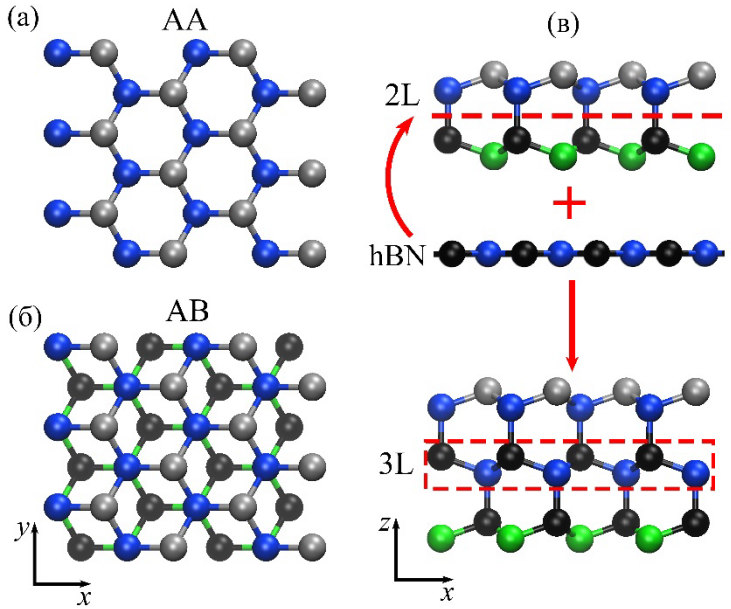


Рис. 1. Начальные структуры борнитрана AA (а) и AB (б) в проекции на плоскость *xy*. (в) Схема создания многослойных борнитранов.

Поскольку масса водорода меньше массы бора и азота, водород был удален из элементарной ячейки, а к краевым атомам была добавлена масса водорода. Таким образом, на рис. 1 атомы азота и бора с атомными массами 14,0067 г/моль и 10,811 г/моль, соответственно, показаны синим и черным цветом, а краевые атомы – зеленым и серым.

В данной работе рассматриваются диаманы и борнитраны с числом слоев графена/ гексагонального нитрида бора (hBN) (L) от 2 до 50, где 2L – диаман/борнитран. На рисунке 1в представлена схема генерации многослойных диаманов и борнитранов. С помощью самописной программы создаются многослойные структуры путем добавления нового слоя

hBN между двух слоев борнитрана 2L (красная пунктирная линия на рис. 1в). Методика расчета констант упругости двумерных материалов представлена в работе [3]. Для исследования влияния толщины многослойных диаманов и борнитранов на прочность одноосное растяжение прикладывается вдоль направления кресло и зигзаг.

При расчетах констант упругости двумерных материалов принято пренебрегать толщиной структур и выражать константы упругости в Н/м. Как было показано ранее, константы упругости диамана в Н/м линейно возрастают с увеличением числа графеновых слоев в структуре [4]. Однако, в настоящей работе константы упругости выражаются в ГПа, для того чтобы сравнить многослойные диаманы и борнитраны с их трехмерными аналогами. Толщина одного слоя графена/hBN принимается равной 3.4 Å, толщина многослойных структур соответственно 3.4×L.

На рисунках 2, 3 представлены зависимости модуля Юнга и коэффициента Пуассона от толщины диамана и борнитрана, соответственно. Видно, что увеличение слоев в структуре диамана и борнитрана приводит к увеличению модуля Юнга. Однако, существует критическое значение количества слоев (20L) диамана/борнитрана, после достижения которого константы упругости меняются незначительно. Модуль Юнга диамана 20L в два раза превышает модуль Юнга диамана 2L. Диаман 50L имеет модуль Юнга (1243 ГПа), сравнимый с алмазом (1220 ГПа). Коэффициент Пуассона диамана близок к нулю. Увеличение толщины диамана приводит к уменьшению коэффициента Пуассона, что указывает на увеличение жесткости материала.

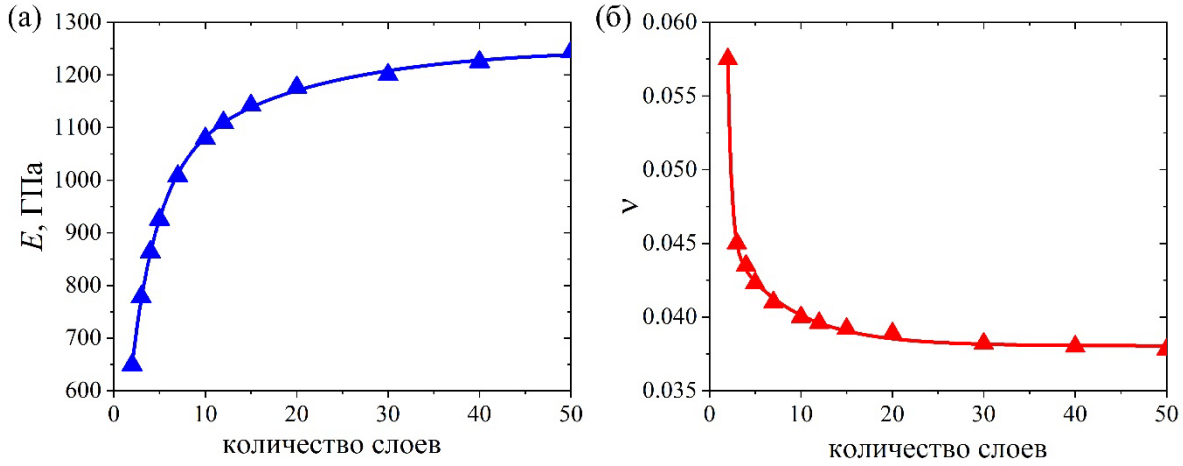


Рис. 2. Зависимость Модуля Юнга (а) и коэффициента Пуассона от количества слоев графена в диамане.

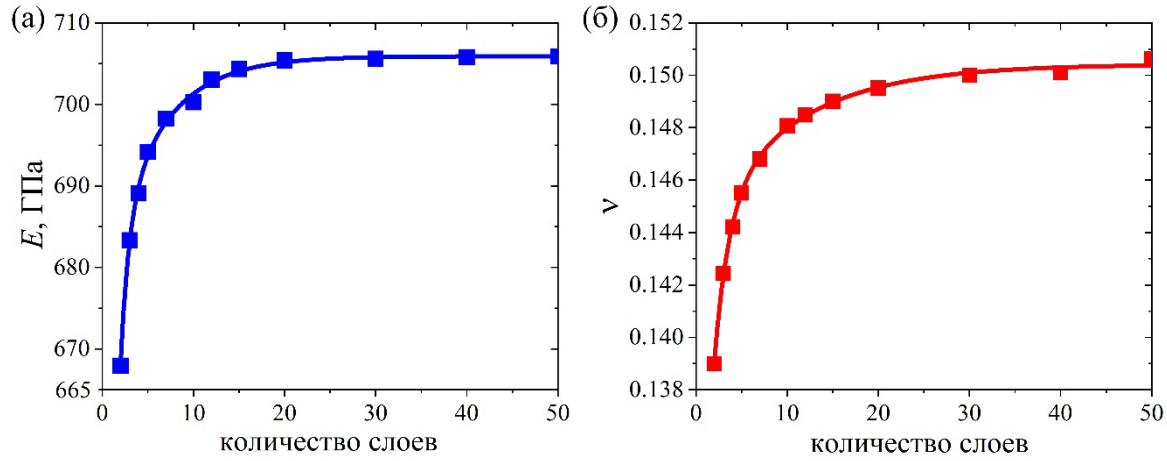


Рис. 3. Зависимость Модуля Юнга (а) и коэффициента Пуассона от количества слоев гексагонального нитрида бора в борнитране.

В отличие от диамана, увеличение толщины борнитрана не приводит к значительному увеличению констант упругости: модуль Юнга борнитрана 50L на 5% больше по сравнению с 2L. Модуль Юнга борнитрана – 668 ГПа, что меньше, чем у его трехмерного аналога вюрцитного нитрида бора (860 ГПа) [5] и двумерного hBN (800 ГПа) [6].

Установлено, что модуль Юнга диамана увеличивается с увеличением количества слоев, в то время как коэффициент Пуассона незначительно уменьшается. Для диамана прочность изменяется от 200 ГПа до 450 ГПа при увеличении толщины от 2 до 50 слоев. Прочность диамана при растяжении вдоль направления зигзаг в два раза больше, по сравнению с растяжением вдоль направления кресло. Для борнитрана количество слоев и направление растяжения практически не влияют на его константы упругости и прочность.

Литература

1. V.B. Mbayachi, E. Ndayiragije, T. Sammani, S. Taj E.R., Mbuta. Graphene synthesis, characterization and its applications: a review. Results Chem., 2021, 3 100163.
2. P.V. Bakharev, M. Huang, M. Saxena, S.W. Lee, S.H. Joo, S.O. Park, J. Dong, D.C. Camacho-Mojica, S. Jin, Y. Kwon, M. Biswal, F. Ding, S.K. Kwak, Z. Lee, R.S. Ruoff. Chemically induced transformation of chemical vapour deposition grown bilayer graphene into fluorinated single-layer diamond // Nat. Nanotechnol., 2019, 15 59-66.
3. P.V. Polyakova, R.T. Murzaev, D.S. Lisovenko, J.A. Baimova. Elastic constants of graphane, graphyne, and graphdiyne. Comput. Mater. Sci., 2024, 244 113171.
4. A.G. Kvashnin, P.V. Avramov, D.G. Kvashnin, L.A. Chernozatonskii, P.B. Sorokin. Features of electronic, mechanical, and electromechanical properties of fluorinated diamond films of nanometer thickness. J. Phys. Chem. C, 2017, 121 28484-28489.
5. M. Deura, K. Kutsukake, O. Kentaro, Y. Ohno, I. Yonenaga, T. Taniguchi. Nanoindentation measurements of a highly oriented wurtzite-type boron nitride bulk crystal. Jpn. J. Appl. Phys., 2017, 56. 030301.
6. L. Boldrin, F. Scarpa, R. Chowdhury, S. Adhikari. Effective mechanical properties of hexagonal boron nitride nanosheets. Nanotechnology, 2011, 22 505702.

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ БЫСТРОГО ДЖОУЛЕВА НАГРЕВА НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА АЭРОГЕЛЕЙ ОКСИДА ГРАФЕНА

Д. Н. Попов, А. Р. Прокопьев

ФГАОУ ВО «Северо-Восточный федеральный университет имени М.К. Аммосова», Якутск
dmiitryy09@gmail.com

Аэрогели оксида графена (аОГ) обладают высокой удельной поверхностью и пористостью, что делает их перспективными материалами для суперконденсаторов, сорбентов и электродов химических источников тока. Однако исходный аОГ имеет низкую электрическую проводимость из-за высокого содержания кислородсодержащих функциональных групп и дефектов в структуре материала. Основные методы активации и структурного восстановления аОГ обладают рядом недостатков, среди которых длительность процесса, высокая стоимость и негативное воздействие на окружающую среду. В отличие от них, метод быстрого джоулева нагрева (БДН) позволяет проводить глубокое восстановление материала за чрезвычайно короткое время.

Метод основан на пропускании короткого электрического импульса через образец аОГ, что вызывает быстрый омический нагрев. В результате происходит эффективное удаление кислородсодержащих функциональных групп с выделением газообразных продуктов, способствующее формированию иерархически пористой структуры. Кроме того, высокотемпературный нагрев стимулирует кристаллизацию аморфной части материала с образованием sp^2-гибридизованного углерода. Благодаря высокой скорости процесса и стерическим ограничениям образуется многослойный дефектный графен [1], что подтверждается данными спектроскопии комбинационного рассеяния (рис. 1).

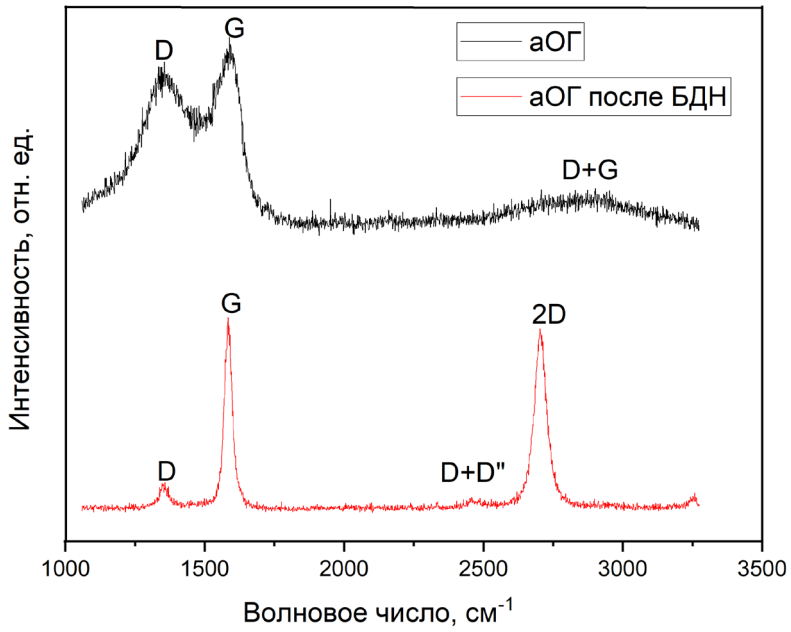


Рис. 1. Спектры комбинационного рассеяния света. Черная линия – исходный аОГ, красная линия – аОГ после БДН.

аОГ получали методом лиофильной сушки водных суспензий ОГ, синтезированных модифицированным методом Хаммерса. Восстановление проводили на лабораторной установке БДН, которая описана в работе [2], в вакуумной камере (0,3 бар). Варьировали напряжение разряда (100–300 В) и ёмкость конденсаторной батареи, что позволяло изменять

энергию импульса. Полученные материалы характеризовали методами сканирующей электронной микроскопии, рентгеновской энергодисперсионной спектроскопией, спектроскопией комбинационного рассеяния света, БЭТ и двухзондовой вольтамперометрией плёнок.

Установлено, что увеличение мощности БДН приводит к более глубокому восстановлению аОГ. В спектрах КРС наблюдается резкое снижение интенсивности D-пика, рост отношения I_{2D}/I_G и появление чёткого 2D-пика, указывающее на восстановление sp^2-гибридизации углерода.

Метод БДН позволяет эффективно управлять степенью восстановления аОГ путём варьирования мощности разряда. Оптимальные параметры обеспечивают баланс между глубиной восстановления, сохранением пористой структуры и низким электрическим сопротивлением. Полученные результаты открывают возможности целенаправленного регулирования свойств, восстановленных аОГ для применения в энергонакопительных устройствах.

Работа выполнена в рамках Государственного задания FSRG-2025-0009

Литература

1. A.C. Ferrari, D.M. Basko. Raman spectroscopy as a versatile tool for studying the properties of graphene. Nature Nanotech., 2013, 97(18) 235-246
2. А.Р. Прокопьев, Н.Н. Лоскин, Д.Н. Попов. Быстрый джоулев нагрев для синтеза графенсодержащих порошков из пластиковых отходов. РЭНСИТ, 2025, 17(3) 305-312.

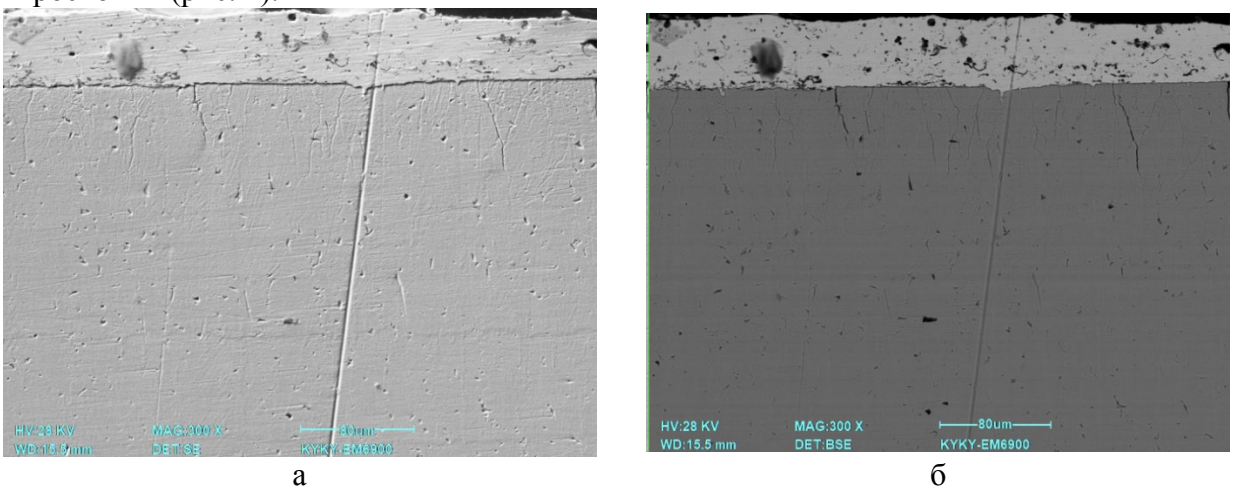
ПРЕДПОСЫЛКИ ВОЗНИКНОВЕНИЯ ТЕХНОЛОГИИ ЭЛЕКТРОННО-ИОННО-ПЛАЗМЕННОГО НАПЫЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОЭРОЗИОННОСТОЙКИХ ПОКРЫТИЙ БЕЛЫЙ ЭЛЕКТРОКОРУНД - СЕРЕБРО

В.В. Почетуха[1], Д.А. Романов[1], В.Е. Громов[1], Е.С. Денисенко[2]

[1]Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк
[2]Филиал Кузбасского государственного технического университета имени Т.Ф. Горбачева в г. Прокопьевске, Прокопьевск
v.pochetuha@mail.ru

Данным сообщением оповещаем научную общественность о разработке основ новой бережливой технологии электронно-ионно-плазменного напыления электроэрозионностой ких покрытий белый электрокорунд - серебро. Реализация новой бережливой технологии электронно-ионно-плазменного напыления базируется на формировании покрытий в три стадии. Первая стадия: получение покрытия за счет формирования продуктов электрического взрыва проводников. Вторая стадия: модификация покрытия, полученного на первой стадии, высокоэнергетическим сильноточным электронным пучком. Третья стадия: азотирование покрытия, прошедшего первую и вторую стадию.

В рамках плана текущего научного проекта на финальной стадии осуществлено фор мирование системы белый электрокорунд - серебро. Электрокорунд белый (марки 25А, 24А, 23А) – высокочистый синтетический абразив (более 99 %), получаемый плавлением глинозема. Отличается высокой твердостью (по шкале Мооса), хрупкостью и термостойкостью. Применяется для чистового шлифования, заточки инструмента, пескоструйной обработки и полировки высокоуглеродистых и быстрорежущих сталей. В качестве примера рассмотрим подтверждение получения на поверхности медной подложки покрытий системы Al_2O_3–Ag методом электровзрывного напыления на первой стадии. Исследования структуры покрытий проведены взаимодополняющими методами световой микроскопии, сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии, атомно-силовой микроскопии, рентгенофазового анализа и рентгеноспектрального анализа. В качестве подтверждения приведем результат исследования указанного покрытия методом сканирующей электронной микроскопии (рис. 1).



а б

Рис. 1. Структура покрытия системы Al_2O_3–Ag, полученного методом электровзрывного напыления на первой стадии электронно-ионно-плазменного напыления. Сканирующая электронная микроскопия. Прямой шлиф. Изображение (а) получено во вторичных электронах SE, изображение (б) получено в обратно отраженных электронах BSE

Исследование проведено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 075-00087-2401.

АКТУАЛЬНЫЕ ЗАДАЧИ ПРОИЗВОДСТВА СТАЛЬНЫХ ТРУБ

И.Ю. Пышминцев

Трубная Металлургическая Компания, Москва
igor.pyshmintsev@tmk-group.com

Человечество накопило значительный опыт производства труб из различных материалов, включая дерево, глину, бетон, свинец, медь, сплавы, различные полимеры и керамики. Выбор материала определяется его стоимостью, доступностью и комплексом свойств, способных удовлетворить самый широкий круг потребностей. С этой точки зрения сталь как ключевой конструкционный материал, выплавляемый ежегодно в количестве более 1,85 млрд тонн, что эквивалентно среднему душевому потреблению около 200 кг, нашла широчайшее применение для изготовления труб различного применения. Если в мире около 10% выплавленной стали используется для производства труб, то в России практически четверть внутреннего потребления стали составляют трубы, что, в значительной степени, связано с развитием добычи углеводородов и трубопроводного транспорта. Следует отметить, что черная металлургия и ее главный продукт сталь с момента ее возникновения до наших дней прошли большой эволюционный путь. Это состояло в повышении производительности, снижении удельного расхода материальных ресурсов и энергии, росте экологической безопасности и, конечно, совершенствовании комплекса свойств: механических и коррозионных. Необходимость уверенной конкуренции с другими материалами заставляет постоянно совершенствовать технологии, находить новые решения для применения высокопрочных эффективных и безопасных материалов для различных областей применения. Важной характеристикой материала является возможность переработки с минимальными потерями и энергетическими затратами с полным сохранением основных свойств.

Увеличение глубин залегания углеводородов до 4000-5000 м, разрабатываемых в последние годы, предполагает применение материалов высокой прочности, обеспечиваемой химическим составом, отличающимся комплексным легированием, и режимами термической обработки. Разработка новых залежей сопряжена с высокими температурами на забое до 120-150 ^{o}C, наличием в добываемом флюиде растворенных коррозионно-активных компонентов, к которым, в первую очередь, следует отнести сероводород и углекислый газ, ставит вопросы о применении высокопрочных и коррозионно-стойких сталей. Это привело к существенному усложнению марочного состава сталей для труб нефтяного сортамента, применению легированных сталей, включая нержавеющие мартенситного класса с пределом текучести не менее 862 МПа.

Развитие системы магистральных трубопроводов, их прокладка в районах со сложными геологическими и климатическими условиями требует применения новых высокопрочных материалов, использование которых позволяет повысить эффективность транспорта за счет увеличения рабочего давления газа, производительности, больших расстояний между газокомпрессорными станциями при безусловном обеспечении надежности. Идея использования новых высокопрочных материалов для изготовления труб с пределом текучести не менее 690 МПа возникла еще в конце 60-х годов, но не получила развития в силу состояния технологий и соответствующего уровня свойств. Следующая попытка была сделана уже на рубеже веков, завершившаяся путем строительства нескольких опытных участков из труб категорий прочности Х100-Х120 в Северной Америке, давление в которых, тем не менее, было сохранено на базовом для «обычных» труб Х70 значениях. Серьезной новацией в мировом масштабе стало строительство в России двух веток крупного газопровода диаметром 1420 мм Бованенково-Ухта на рабочее давление 11,8 МПа из труб класса прочности К65 (предел текучести не менее 555 МПа). Этому решению предшествовало комплексное исследование эксплуатационной надежности таких сталей,

включавшее натурные полигонные испытания на остановку магистральной трещины, позволившей установить ряд новых закономерностей в механизмах разрушения, в формировании микроструктуры при термомеханическом воздействии и разработать комплекс технологий производства. Показано, что способность предотвращать распространение вязкой магистральной трещины определяется размером и степенью пластической деформации в очаге разрушения, что, в свою очередь, является эквивалентом удельной энергоемкости при движении трещины с высокой скоростью, соизмеримой с быстротой декомпрессии в трубопроводе. Изучено влияние микроструктуры и текстуры на характеристики трещиностойкости, установлена роль компоненты развернутого куба в контроле механизма разрушения, формировании хрупких расщеплений преимущественно в центре листа, где плотность данной компоненты максимальная.

Вызовом сегодняшнего дня стало применение еще более прочных сталей для развития восточного направления транспорта газа. Для решения этой задачи в 2022-2024 гг. была проведена масштабная работа по исследованию надежности труб новых классов прочности К70 и К80 на рабочее давление 14,7 МПа. Исследование связи микроструктуры и характера разрушения труб из таких материалов показали общий тип текстуры в листе К65-К80, но в силу ограниченных пластических свойств особо прочных материалов обеспечение требуемой трещиностойкости на сегодня достигается лишь в трубах класса прочности К70, технологии производства которых полностью освоены в России.

Оценка возможностей применения труб различных классов прочности для реализации новых технологий энергоперехода, основанных на применении водорода в качестве топлива, потребовало комплексной оценки его влияния на сопротивление разрушению. Базовые характеристики водорода, а именно низкая энергетическая плотность, низкая плотность даже в сжиженном состоянии определяет высокие удельные энергетические затраты на транспортировку на дальние расстояния. В связи с этим закономерности взаимодействия стали с водородом при высоких давлениях требует значительного внимания. Создан комплекс оборудования, позволяющий насыщать исследуемые материалы водородом, определять его концентрацию, распределение по сечению образцов с определением степени влияния на комплекс механических свойств. Изучены процессы наводороживания сталей различного класса при насыщении из газовой фазы при высоком давлении и при электрохимической обработке в электролите с установлением основных закономерностей. Проведено систематическое исследование закономерностей водородного охрупчивания конструкционных сталей массового сегмента, включая трубные. Показано, что применение высокопрочных материалов в средах с высоким потенциалом наводороживания является опасным ввиду возможного хрупкого разрушения путем межзеренного и внутризеренного скола. Впервые продемонстрировано, что даже в нержавеющих сталях аустенитного класса с высокими значениями стойкости к образованию мартенсита деформации имеет место охрупчивание поверхностных слоев, обусловленное низкой диффузионной подвижностью при высокой растворимости водорода.

ВЛИЯНИЕ ГРАФИТАЦИИ НА СТРУКТУРУ И ТОПОЛОГИЮ ПОР В УГЛЕРОД-УГЛЕРОДНОМ КОМПОЗИЦИОННОМ МАТЕРИАЛЕ

Е.С. Разумовский

АО «Уральский научно-исследовательский институт композиционных материалов», Пермь
erazumovskij@yandex.ru

Углерод-углеродный композиционный материал (далее – УУКМ) является структурно неоднородным материалом, с ярко выраженной неоднородностью на разных масштабных уровнях, начиная от мезоуровня – размера кристаллитов, заканчивая макроуровнем – конгломераты топологически связанных макропор. Неоднородность УУКМ обусловлена стохастическими процессами синтеза материала, начиная от деструкции полимеров на стадии карбонизации, заканчивая кристаллизацией пиролитического углерода из газовой фазы на пористую преформу, которая описывается только методами статистической физики. Состояние УУКМ после стадии CVD/CVI образования квазигомогенного поликристалла пиролитического углерода по объему карбонизованного углепластика при должном контроле профиля концентрации газа-прекурсора сводит конечную структуру УУКМ к метастабильной, промежуточной. Ключевым элементом неоднородности УУКМ является пиролитическая углеродная матрица, имеющая стохастическую структуру. Стохастическая структуру обуславливает наличие флуктуирующих значений полей напряжений и деформаций в зернах поликристаллической матрицы. При величинах макронапряжений значительно ниже соответствующих макроскопических пределов прочности УУКМ в зернах в кристаллографической системе координат могут реализовываться мезонапряжения превышающие пределы прочности монокристалла пироуглерода, что приводит к повреждениям зерен. Повреждения зерен носят дисперсный характер, приводя к локальному изменению физико-механических характеристик УУКМ. Данные повреждения с позиции теории перколяции при определенной накопленной доле могут вызывать образование магистральных трещин, приводящих к разрушению материала [1]. Так как количественная оценка данного явления может быть описан только методами математической статистики, то процесс графитации представляющий собой термохимический процесс приведения исходного материала к более термодинамически устойчивой форме будет качественно снижать вероятность реализации такого фактора в пиролитической углеродной матрице, как инициация и накопление повреждений.

Графитация приводит к минимизации потенциала Гиббса системы. В процессе графитации структура УУКМ качественно изменяется: увеличиваются размеры кристаллитов, снижаются величины межплоскостных расстояний в кристаллитах. В части развитой поровой структуры происходит слияние (коалесценция) малых пор материала, частичная аннигиляция пор. Данный эффекты описываются уравнениями Диффузии Фика (процесс самодиффузии внутри УУКМ) и дополняются уравнениями Кельвина и Лапласа [].

Ключевым вопросом исследования являлось определения температурных границ, при которых происходят предрекристаллизационные процессы, и не происходит существенного изменения структуры УУКМ и температурой, а также температуры при которой рост степени графитации [3] (текстурированности) УУКМ является максимальным. В результате исследования определено, что требуемая температура при которой происходят предрекристаллизационные процессы и не происходит существенного снижения пористости составляет 1750-1800^{o}C. Методами компьютерной томографии подтверждены гипотезы объединения малых пор в более крупные, как наиболее энергетически выгодной структуры УУКМ. Увеличение температур графитации свыше 2500 ^{o}C для волокон на основе ПАН приводит к уменьшению кажущейся плотности и росту пористости УУКМ, в большей степени закрытой, что обусловлено сложной надмолекулярной структурой первичного волокна ПАН, что после образования углеродного волокна и стадии графитации УУКМ

создает существенную анизотропию всех физико-механических свойств волокна в сравнении поликристаллическим пироуглеродом.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации на проведение фундаментальных научных исследований (проект FSNM-2026-0006).

Литература

1. E.S. Razumovskii, V.E. Shavshukov, A change in the bearing capacity of the hip joint Endoprosthesis as a result of damage to the polycrystalline matrix of the C/C composite. Procedia Structural Integrity.2024, 65,191-199.
2. G. Kaptay, A new paradigm on the chemical potentials of components in multi-component nano-phases within multiphase systems. RSC Advances. 2017, 7 (65), 41241-41253.
3. C. L. Mantell, Carbon and Graphite Handbook. New York: John Wiley & Sons, Inc. 1968.

ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫЙ СИНТЕЗ И КОНСОЛИДАЦИЯ ПЕРСПЕКТИВНЫХ КЕРАМИКО-МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПОРОШКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ

А.С. Рогачев

Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения им. А.Г. Мержанова РАН (ИСМАН), Черноголовка
rogachev@ism.ac.ru

Керамо-металлические композиты (керметы) имеют решающее значение для современной промышленности [1]. Производство этих материалов методом СВС началось в 1980-х годах на основе принципа термически сопряженных реакций. Необходимая для синтеза теплота выделялась в реакции образования керамической фазы из элементов, и этой теплоты было достаточно для формирования металлического связующего. Они получили название «синтетические твердые инструментальные материалы» (СТИМ) и включают в себя цементированные карбиды, цементированные бориды и их комбинации [2]. Термодинамический и кинетический анализы показали, что экзотермические реакции между переходными металлами и углеродом или бором выделяют количество тепла, достаточное для плавления до 50 вес.% инертных добавок, образующих металлическое связующее [3]. Для консолидации этих материалов была разработана специальная технология квазиизостатического горячего прессования – «СВС-прессование». В обзоре представлен путь развития этих материалов — от СТИМ до новейших кногокомпонентных керметов, которые появились и стали быстро развиваться в последнее десятилетие, получив название «высокоэнтропийные материалы».

Высокоэнтропийные сплавы и соединения отличаются от традиционных сплавов и простых соединений тем, что состоят из пяти и более компонентов в равных или сопоставимых концентрациях, образующих однофазный разупорядоченныйтвердый раствор. Высокоэнтропийные керамико-металлические композиты включают в себя несколько типов материалов, например, керметы, состоящие из высокоэнтропийной керамической фазы ($HfTaZrNbTiC_5$, $VNbTaMoWC_5$ и др.) с простым металлическим связующим (Co, Ni, Fe); керметы, состоящие из простых карбидов (например, TiC) с высокоэнтропийным связующим (CoCrFeNiMn и др.); комбинации многокомпонентных керамических и связующих фаз. Механическая, термическая и электрическая активация используются для дальнейшего расширения составов СВС-керметов. Новые результаты динамического рентгенофазового анализа и дифракции синхротронного излучения показывают, что фазовый состав и кристаллическая структура кермета формируются в течение нескольких секунд за фронтом волны горения [4]. Консолидация СВС-керметов с использованием СВС-прессования, электроискрового плазменного спекания, вакуумного спекания и горячего прессования позволяет получать керметы с высокими механическими и функциональными свойствами.

Литература

1. J. García, V.C. Ciprés, A. Blomqvist, B. Kaplan, Cemented carbide microstructures: a review. Int. J. Refractory Metals & Hard Materials, 2019, 80 40–68
2. E.A. Levashov, A.S. Mukasyan, A.S. Rogachev, D.V. Shtansky, Self-propagating high-temperature synthesis of advanced materials and coatings. Int. Mater. Rev., 2017, 62(4) 203-239.
3. A.S. Rogachev, S.G. Vadchenko, et al., Combustion synthesis of TiC-based ceramic–metal composites with high entropy alloy binder, J. Eur. Ceram. Soc., 2020, 40, 2527–2532.
4. A.S. Rogachev, I.D. Kovalev, M.R. Sharafutdinov, et al. Time-resolved X-ray diffraction study of phase transformations in TiC–CoCrFeNiCu system during SHS. Int. J. of SHS, 2025, 34(1), 76-80.

Данная работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект 25-13-00040. (https://rscf.ru/project/25-13-00040/)

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ СМЯТЫХ ЧЕШУЕК ГРАФЕНА И НАНОЧАСТИЦ МЕТАЛЛОВ

Е.А. Рожнова, Ю.А. Баимова

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
rozhnova.elizavetaa@mail.ru

В настоящее время большой интерес вызывает создание новых композиционных материалов с улучшенными механическими свойствами. Одним из материалов, подходящих для создания композитов является графен, сочетающий в себе такие свойства, как гибкость, сверхпрочность, легкость. Комбинация двух разных элементов, таких как графен и наночастицы металлов, может придать ряд новых уникальных свойств полученному материалу. На сегодняшний день активно ведутся исследования взаимодействия графена с наночастицами различных металлов, таких как медь, алюминий, никель, титан [1]. В данной работе методом молекулярной динамики исследуются механические свойства композитов графен/металл, где в качестве матрицы композита рассматривается скомканный графен. Оценка механических свойств композита осуществляется посредством одноосного растяжения.

В работе рассматриваются два типа композитов: графен/Ni и графен/Cu. Матрицей композита является скомканный графен, который представляет собой свернутые чешуйки графена, соединенные между собой силами Ван-дер-Ваальса. Численные эксперименты проводятся в свободно распространяемом пакете молекулярно-динамического моделирования LAMMPS. Для описания межатомных взаимодействий углерод-углерод применяется потенциал AIREBO, для описания взаимодействий металл-металл – потенциал EAM. Для структуры графен/Ni используется потенциал Морзе, для описания взаимодействий углерод-металл, а для системы графен/Cu применяется потенциал Леннарда-Джонса. Параметры потенциалов были выбраны в соответствии с данными из работы [2]. Во всех случаях использовались периодические граничные условия вдоль направлений x, y и z.

Результаты моделирования показали, что максимальное растягивающее напряжение для композита графен/Cu – 35 ГПа, в то время как для композита графен/Ni это значение выше и составляет около 90 ГПа. Модуль Юнга определяется из линейного режима кривых напряжение-деформация при растяжении. Модуль упругости для композита графен/Ni получен как 296.9 ГПа, в то время как для композита графен/Cu это значение составляет 65.9 ГПа. Сравнение модулей Юнга показывает, что композит графен/Ni имеет более высокую жесткость, по сравнению с композитом графен/Cu. Композит графен/Cu обладает наибольшей пластичностью, что объясняется наличием крупных наночастиц меди, которые менее связаны с графеновой сеткой, чем наночастицы Ni, что позволяет углеродным связям легко перестраиваться при растяжении. Таким образом, механические свойства композитов с графеновой матрицей сильно зависят от выбранного металла и их силы взаимодействия с графеном. Если металл-наполнитель слабо взаимодействует с графеном, то при формировании композита образуются крупные наночастицы металла, которые препятствуют формированию однородной графеновой сетки, что снижает прочностные свойства композита.

Литература

1 L.R. Safina, J.A. Baimova, K.A. Krylova, R.T. Murzaev, R.R. Mulyukov Simulation of metal-graphene composites by molecular dynamics: a review. Lett. Mater., 2020, 10(3) 351-360.

2 L.R. Safina, E.A. Rozhnova, R.T. Murzaev, J.A. Baimova Effect of interatomic potential on simulation of fracture behavior of cu/graphene composite: A molecular dynamics study. Appl. Sci., 2023, 13(2) 916.

МНОГОУРОВНЕВОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ УЧАСТКА МЕДНОГО ПРОВОДНИКА МОРСКОГО КАБЕЛЯ С УЛУЧШЕННЫМИ ЭКСПЛУАТАЦИОННЫМИ СВОЙСТВАМИ

К.А. Романов, Н.С. Кондратьев, А.И. Швейкин

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь
karomanov@pstu.ru

Применение прутков и проволок актуально для многих областей промышленности: в машиностроительной отрасли прутки широко используются для изготовления длинномерных валов, осей [1] и поршневых конструкций [2]; в электрической промышленности из них производят несущие тросы [3] и воздушные провода [4]; в морской отрасли – проводники для кабелей [5], в медицине – различные импланты, например, стержни для позвоночника [6]. Технологический процесс волочения является основным способом изготовления проволок требуемого диаметра [7]. Данный метод представляет собой многостадийное протягивание проволоки через штампы с меньшим поперечным сечением, чем исходный диаметр заготовки. Чистая медь из-за высокой проводимости является одним из основных материалов для изготовления проволок, в том числе для проводников морских кабелей [5].

Основными элементами морских кабелей являются оболочка, наполнитель, стальная оболочечная проволока и медный проводник, состоящий из множества проволок [5]. В настоящей работе объектом моделирования является центральная проволока медного проводника, окруженная другими проволоками [5]. Эксплуатация морских кабелей подразумевает их циклическое механическое нагружение при действии волн и течений, что приводит к необходимости обеспечения улучшенной трещиностойкости для материала проволоки. При этом давление воды оказывает существенное влияние на кабель, поэтому проволоки должны иметь значительный запас статической прочности (достаточный предел текучести) для предотвращения возникновения в них пластических деформаций при возникающих воздействиях. Указанные критерии прочности обладают разнонаправленной зависимостью от размера зерна – при его уменьшении трещиностойкость повышается, в то время как, предел текучести увеличивается. В связи с этим проволоки должны обладать неравномерным распределением размера зерна по радиусу для обеспечения лучшего сопротивления развитию трещин на поверхности и высоким пределом текучести в объеме. Стоит отметить, что во многих исследованиях, например в [8, 9], отмечается, что изделия с градиентной зеренной структурой обладают повышенными эксплуатационными свойствами по сравнению с деталями, в которых распределение размеров зерен по объему является равномерным.

Для проектирования конструкций с требуемыми для эксплуатации физико-механическими свойствами целесообразно применять цифровую методику изготовления функциональных материалов-изделий, с помощью которой возможно подобрать необходимое распределение параметров внутренней структуры для обеспечения предписываемых рабочих характеристик детали. В рамках данной методики последовательно решаются оптимизационные задачи поиска требуемой внутренней структуры, обеспечивающей необходимые эксплуатационные свойства, и параметров технологического процесса для получения необходимой структуры на этапе изготовления. При этом ядром методики является применение многоуровневых конститутивных моделей (КМ) на базе физических теорий пластичности [10], в которых явным образом через внутренние переменные учитываются эволюция характеристик структуры и механизмы деформирования на разных структурно-масштабных уровнях. Заметим, что использование в конечно-элементных решателях модели материала на базе многоуровневых КМ является вычислительно затратным, поэтому в настоящей работе применяется комбинированный

подход к моделированию [11]. В данном подходе на первом этапе производится расчет краевой задачи с применением макрофеноменологической модели материала, а затем для выбранных областей изделия проводится детальное моделирование с учетом эволюции внутренней структуры с использованием многоуровневых КМ.

В настоящей работе разработанная методика цифрового проектирования была применена для поиска распределения размера зерна по радиусу фрагмента центральной проволоки в медном проводнике морского кабеля [5, 12]. В данном случае процессом эксплуатации являлся изгиб проволоки с учетом действия окружных проволок, процессом изготовления – несколько проходов волочения проволоки через штампы с разным поперечным сечением. В рамках комбинированного подхода для некоторых областей проволоки применялась многоуровневая КМ с учетом соотношений для прогнозирования усталостной трещиностойкости (модифицированное соотношение Пэриса [13]) и определения предела текучести (закон Холла-Петча [14]). При этом в ходе процесса волочения на поверхности проволоки происходит измельчение зерен, которое в многоуровневой КМ описывалось с применением подмодели фрагментации [15]. Стоит отметить, что согласно условиям эксплуатации, трещиностойкость на поверхности проволоки должна быть выше, поэтому в ходе процесса изготовления для повышения размера зерна в этой области дополнительно добавлялся этап отжига, который моделировался с использованием подмодели динамической рекристаллизации [16]. При применении описанной выше методики были получены результаты, которые согласуются с данными других исследований.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках выполнения государственного задания в лаборатории многоуровневого моделирования конструкционных и функциональных материалов, проект № FSNM-2024-0002.

Литература

1. T. Tian, H. Xu, H. Zheng, W. Zhan, Y. Zhang, H. Zhu, Q. Zhang Effect of rotary swaging on mechanical behaviors of axle steel rod. Materials, 2024, 17(11) 2525.
2. N.S. Rzayev, A. Hasanov, N.F. Gahramanov, V. Salmanov, K.A. Gafarbayli Experimental and theoretical analysis of rod deflection under compressive loading. Int. J. Tech. Phys. Probl. Eng., 2025, 17(1) 330-336.
3. Н.А. Кузнецова, А.А. Ивонин, А.М. Боев, А.А. Нор Несущий трос контактной сети железной дороги. 2020.
4. C.R.F. Azevedo, A.M.D. Henriques, A.R. Pulino Filho, J.L.A. Ferreira, J.A. Araújo Fretting fatigue in overhead conductors: rig design and failure analysis of a grosbeak aluminium cable steel reinforced conductor. Eng. Fail. Anal., 2009, 16(1) 136-151.
5. H. Hu, J. Yan, S. Sævik, N. Ye, Q. Lu, Y. Bu Nonlinear bending behavior of a multilayer copper conductor in a dynamic power cable. Ocean Eng., 2022, 250 110831.
6. L. Carpenedo, F. Berti, L. La Barbera A virtual response surface strategy to predict the effects of contouring on the static and fatigue mechanical behavior of spinal rods. Ann. Biomed. Eng., 2025, 53(3) 644-657.
7. G.A. Santana Martinez, W.-L. Qian, L.K. Kabayama, U. Prisco Effect of Process Parameters in Copper-Wire Drawing. Metals, 2020, 10 105.
8. L. Wang, B. Li, Y. Shi, G. Huang, W. Song, S. Li Optimizing mechanical properties of gradient-structured low-carbon steel by manipulating grain size distribution. Mater. Sci. Eng. A., 2019, 743 309–313.
9. M. Pan, X. Chen, M. He, Y. Kong, Y. Du, A. Hartmaier, X. Zheng, Y. Liu Optimizing fatigue performance in gradient structural steels by manipulating the grain size gradient rate. Materials, 2024, 17(13) 3210.

10. П.В. Трусов, А.И. Швейкин Многоуровневые модели моно- и поликристаллических материалов: теория, алгоритмы, примеры применения. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2019. 605 с.
11. M. Baldin, N. Kondratev, P. Trusov, K. Ostapovich A combined approach to solving applied metal forming problems. Crystals, 2025, 15(2) 101.
12. J. Yan, Ht. Hu, Hl. Lu, Yc. Yin, Yf. Bu, Qz. Lu Experimental Study on the Influence of Cross-Section Type of Marine Cable Conductors on the Bending Performance. China Ocean Eng., 2022, 36 629-637.
13. D. Hu, J. Mao, J. Song, F. Meng, X. Shan, R. Wang Experimental investigation of grain size effect on fatigue crack growth rate in turbine disc superalloy GH4169 under different temperatures. Mater. Sci. Eng. A., 2016, 669 318-331.
14. Z.C. Cordero, B.E. Knight, C.A. Schuh Six decades of the Hall–Petch effect – a survey of grain-size strengthening studies on pure metals. Int. Mater. Rev., 2016, 61(8) 495-512.
15. К.А. Романов, А.И. Швейкин Многоуровневая статистическая конститутивная модель на базе континуальной дислокационной динамики и ее применение для комплексного описания трансформации структуры меди при равноканальном угловом прессовании. Вестн. Перм. нац. исс. политехн. ун-та. Механика, 2025, 4 5-23.
16. D.S. Bezverkhy, N.S. Kondratev Multilevel statistical model describing discontinuous dynamic recrystallization. Russ. Phys. J., 2024, 67(10) 1538-1547.

ДИНАМИЧЕСКАЯ ПРОЧНОСТЬ И МИКРОСТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ДЕФОРМИРОВАНИЯ ПРЕГРАДЫ ИЗ АЛЮМИНИЕВОЙ БРОНЗЫ С КЕРАМИЧЕСКИМ ПОКРЫТИЕМ

Г.Г. Савенков[1, 2], М.С. Смаковский[2], С.А. Атрошенко[3], Е.А. Итин[4], Е.В. Харанжевский[5]

[1]Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет)
[2]ПАО «Пролетарский завод», Санкт-Петербург
[3]Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург
[4]ЦКБ Морской техники «Рубин», г. Санкт-Петербург
[5]Удмуртский государственный университет, г. Ижевск
sav-georgij@yandex.ru

Алюминиевая бронза БрАЖНМц 9-4-4-1 широко применяется в элементах морского судового машиностроения, к которым предъявляются повышенные требования по динамической прочности, коррозионной стойкости и износостойкости. Как правило, выполнение последних требований связано с поверхностным упрочнением высокоэнергетичными методами электродуговой наплавки, лазерной закалки и лазерного легирования. В последнем случае требования по коррозионной и износостойкости могут быть выполнены за счёт нанесения оксидно-керамических покрытий с использованием метода высокоскоростной лазерной обработки поверхности порошковыми смесями различного состава, в частности, комбинацией оксидов титана (TiO_2) и циркония (ZrO_2).

Цель настоящего исследования – оценить влияние покрытий из комбинаций оксида титана и оксида циркония на откольную прочность и механизмы деформационного поведения бронзы БрАЖНМц 9-4-4-1.



a) b) c)

Рис.1. Исходная микроструктура бронзы (a), испытанные образцы (b) и (c)

Методика определения откольной прочности материалов по методу плоского соударения пластин изложена в [1]. Мишени (испытуемые образцы) представляли из себя диски диаметром 90 мм и толщиной 6 мм из бронзы БрАЖНМц 9-4-4-1 ГОСТ 18175–78 со следующими стандартными механическими характеристиками: $\sigma_{0.2}$=385 МПа, σ_B = 725 МПа, δ_5 = 35%, ψ = 36%. Откольная прочность исследуемой бронзы без покрытия находится в диапазоне σ_p = 1,8 – 2,6 ГПа [2].

Технология нанесения покрытия, состоящего из комбинации TiO_2 + ZrO_2 изложена в [3]. Исходная микроструктура бронзы и вид образцов после испытаний представлены на рис. 1.

Испытания образцов проводили в диапазоне скоростей соударения ударника с мишенью V_0 = 145 – 370 м/с, при этом скорость деформации $\dot{\varepsilon}$ находилась в диапазоне (2,5 – 8,2)·10^4 c^{-1}. Пример диаграммы нагружения образца в виде скорости изменения

свободной поверхности при скорости удара 185 м/с ($\dot{\varepsilon}$ =5,3·10^4 с$^{-1}$, σ_p = 2,1 ГПа) приведён на рис. 2.

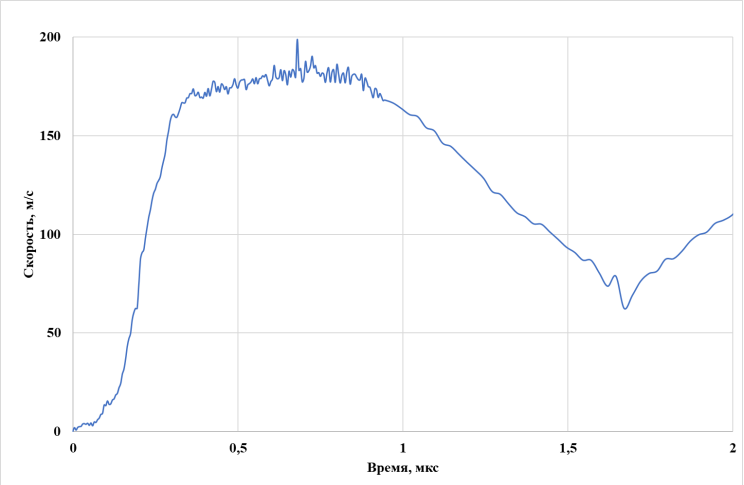
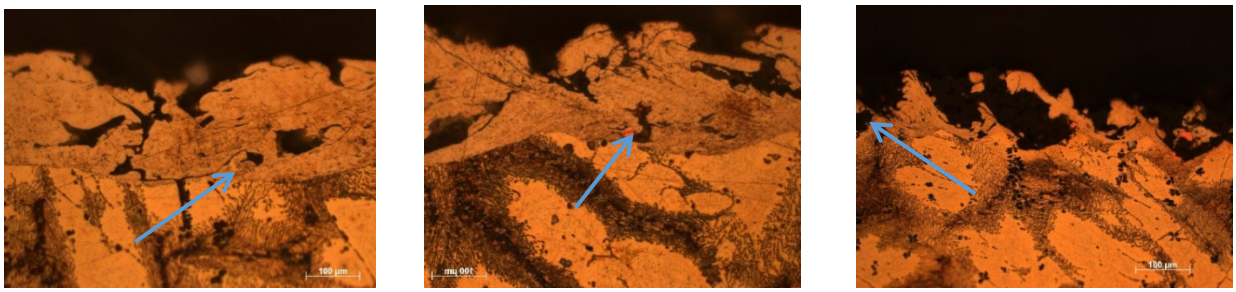


Рис. 2. Изменение скорости свободной поверхности при V_0 = 185 м/с

В результате проведенных экспериментов установлено, что откольная прочность образцов из бронзы БрАЖНМц 9-4-4-1 с комбинированным покрытием TiO_2 + ZrO_2 находится в диапазоне σ_p = (1,95 – 4,95) ГПа, что несколько выше, чем для образцов без покрытия.

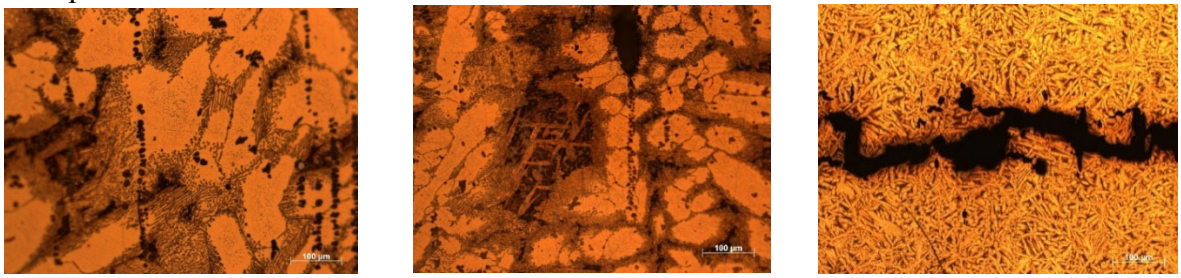
Микроструктурные исследования показали следующее. Покрытие начинает разрушаться уже при скорости удара 145 м/с (рис. 3а). При скоростях удара 345 и 370 м/с



a) b) c)

Рис.3. Эволюция разрушения покрытия (указаны стрелками) образцов при скоростях удара 145 м/с (a), 185 м/с (b), 230 м/с (c)

Изменения в микроструктуре образцов происходят в следующей последовательности: при скорости удара 145 м/с наблюдается большое количество пор, расположенных вдоль направления распространения волны в виде строчек (рис.4а), а также отдельные двойники и ламели мартенсита. В середине образца находится большое количество мелких областей динамической рекристаллизации иногда в виде строчек вдоль волны или в виде полосы – поперек.



a) b) c)

Рис. 4. Изменение микроструктуры образцов в зависимости от скорости удара: 145 м/с (a), 185 м/с (b), 230 м/с (c)

С увеличением скорости удара до 185 м/с появляются трещины, которые являются продолжением строчек пор и аналогично им направлены вдоль распространения ударной волны (рис. 4b). При скорости удара 230 м/с в образце образуется откольная щель (рис. 4c) состоящая из трещин, направленных вдоль и поперёк волны.

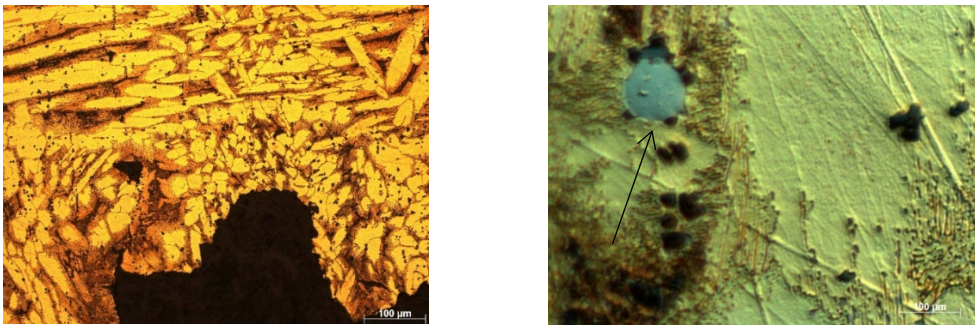
Разнозернистость, присущая структуре образцов, с ростом скорости удара меняет свою форму и вместо поперечных вытянутых зерен перпендикулярно волне при скорости 185 м/с вблизи свободной поверхности появляются зерна, как бы закрученные вокруг центра ротора в виде эвтектоида (рис.5a). При большей скорости (230 м/с) количество



a) b) c)

Рис.5. Эволюция микроструктуры с ростом скорости удара: 145 м/с (a), 185 м/с (b), 230 м/с (c)

участков ротационной деформации увеличивается (рис. 5b), а при скорости удара 370 м/с в структуре вблизи откольной трещины появляются полосы адиабатического сдвига (рис. 5c). Кроме того, при скорости удара 370 м/с вблизи откольной щели происходит измельчение зерна, а дальше от неё – зёрна, вытянутые в поперечном направлении (рис. 6a). Также присутствуют дендриты, что говорит о локальных участках плавления и последующей кристаллизации (рис. 6b), видны и области динамической рекристаллизации с наноструктурой (указана стрелкой).



a) b)

Рис. 6. Микроструктура образца в области откольной щели

Литература

1. Г.Г. Савенков, Т.И. Сычёва, Е.В. Щукина, В.Вас. Баландин, А.М. Брагов. Механические характеристики алюминиевых сплавов морского класса при высоких скоростях деформации. Журнал технической физики, 2025, 8, 1544 – 11551.
2. A.M. Bragov, V.V Balandin, A.Yu. Konstantinov, A.K Lomunov, I.V. Vorobtsov, A.V. Kuznetsov, G.G. Savenkov. High-rate deformation and spall fracture of some metals. Procedia Engineering, 2017, 197, 260 – 269.
3. S.M. Reshetnikov, E.V. Kharanzhevskiy, A.V. Tyukalov, A.R. Gazizyanova, F.Z. Gil'mutdinov, V.L. Vorob'yov, R.M. Zakirova, L.A. Sabanova and G.G. Savenkov Improvement of the corrosion resistance of aluminum bronze in sea water by deposition of oxide-ceramic coatings and inhibitor treatment, International Journal of Corrosion and Scale Inhibition, 2025, 1, 9 – 108.

МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И СТРУКТУРА МЕЛКОЗЕРНИСТОЙ НЕРЖАВЕЮЩЕЙ СТАЛИ ПРИ ДИНАМИЧЕСКОМ НАГРУЖЕНИИ

Е.В. Коптяев[1], М.С. Смаковский[2], Г.Г. Савенков[2, 3]

[1]АО «Армалит – Гражданское судостроение», Санкт-Петербург
[2]ПАО «Пролетарский завод», Санкт-Петербург
[3]Снкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург
savenkov-georgij@yandex.ru

Нержавеющая сталь 08Х18Н10Т широко применяется в морском судовом машиностроении для изготовления элементов судовой арматуры с повышенными требованиями к прочности (в том числе при ударных нагрузках) и износостойкости. Повышенные требования к ударным нагрузкам объясняются тем, что элементы арматуры периодически подвергаются воздействию гидроударов и затекающей ударной волны, скорость деформации при таком нагружении находится в диапазоне $(1 – 5)\cdot 10^3$ с$^{-1}$.

Динамические испытания стали на одноосное растяжение при температуре 20 °С проводились по методу Кольского с использованием методики разрезного стержня Гопкинсона (РСГ). Установка для динамических испытаний, реализующая метод РСГ, состояла из пневматической пушки с системой управления, комплекса измерительно-регистрирующей аппаратуры и комплекта мерных стержней. Измерения деформаций, на основе которых строилась кривая нагружения производилось с помощью наклеенных на боковую поверхность стержней тензодатчиков.

Исследуемая сталь имела следующие стандартные механические характеристики: σ_B = 570 МПа, $\sigma_{0,2} = 350$ МПа, $\delta_5 = 55\%$, $\psi = 65\%$.

Структура стали в исходном горячекатаном состоянии характеризовалась мелким зерном (~10-15 мкм) с карбонитридами (2 балл по шкалам ГОСТ 1778) (рис. 1).

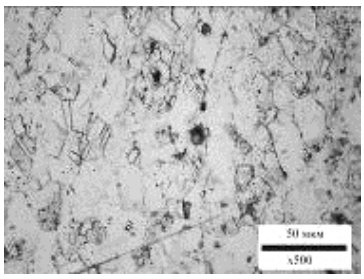


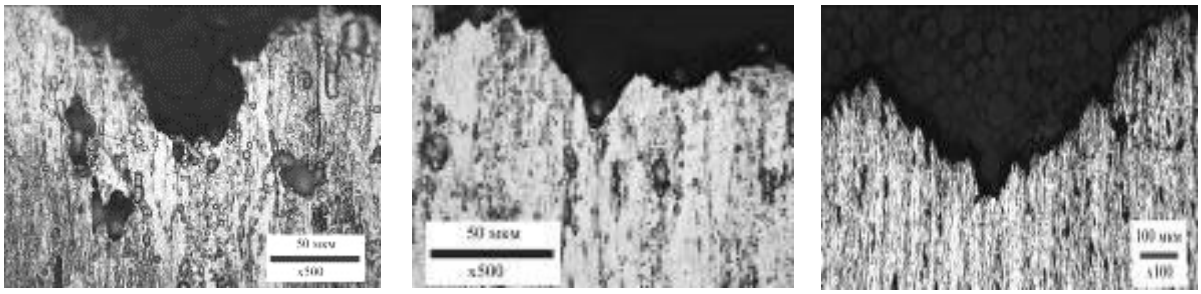
Рис. 1. Микроструктура образцов в исходном состоянии

В процессе испытаний на РСГ были получены следующие результаты: при скоростях деформации $\dot{\varepsilon} = 0{,}95\cdot 10^3$ с$^{-1}$ и $1{,}5\cdot 10^3$ с$^{-1}$ предел прочности σ_B увеличился в 1,35 и в 1,6 раза соответственно, при скорости деформации $\dot{\varepsilon} = 1{,}8\cdot 10^3$ с$^{-1}$ σ_B увеличился в 1,5 раза. Предел текучести увеличился более значительно на (70 – 80)% для всех значений скоростей деформации. Значения характеристик динамической пластичности δ и ψ, практически, не изменились.

Поскольку конструктивные элементы судового машиностроения при численном моделировании рассчитываются на прочность по критерию предельных пластических деформаций Смирнова-Аляева [1]: $\varepsilon_i = \varepsilon_P$ (ε_i – интенсивность деформаций,

$\varepsilon_P = 2\ln\left(\frac{1}{1-\psi}\right)$ – предельная пластическая деформация), то сделать вывод о том, что в условиях гидроудара и затекающей ударной волны прочность элементов судовой арматуры обеспечивается без дополнительного усиления конструкции.

Микроструктурные исследования образцов после динамического растяжения выявили следующие особенности их строения. В ямках структура последовательно представлена: при скорости деформации $\dot{\varepsilon} = 0{,}95 \cdot 10^3$ с$^{-1}$ «отрывом» на торцах неравноосных (50х10 мкм) фрагментов в форме чечевицы и «боковыми скосами» в виде полосовых структур фрагментированного состояния (рис. 2а); при скорости деформации $\dot{\varepsilon} = 1{,}5 \cdot 10^3$ с$^{-1}$ полосовыми структурами шириной 15±5 мкм в зонах отрыва (рис. 2b); при $\dot{\varepsilon} = 1{,}8 \cdot 10^3$ с$^{-1}$ также структурами полосового вида шириной не более 5 мкм (рис. 2c). Как известно [2] полосовые структуры характеризуют предельно упрочненное состояние металла в виде аккомодационных формирований деформационной природы.



a) b) c)

Рис. 2. Микроструктура образцов в зоне разрушения

Литература

1. В.В. Селиванов. Механика разрушения деформируемого тела. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 1999. 420 с.
2. В.В. Рыбин. Большие пластические деформации и разрушение металлов. М.: Металлургия, 1986. 224 с.

ПОВЕРХНОСТНЫЕ СВОЙСТВА И СПИНОВЫЕ ВОЛНЫ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ/ФЕРРОМАГНИТНЫХ СВЕРХРЕШЕТОК

А.И. Самигуллина[1], А.Р. Юлдашева[1], И.Ф. Шарафуллин[1], Н.Т. Диеп[2]

[1]Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия
[2]Лаборатория теоретической физики и моделирования, СУ Сержи-Париж Университет CNRS, Сержи-Понтуаз, Франция
angelasamig2002@gmail.com

В настоящее время возбуждение и распространение спиновых волн в хиральных магнитных структурах с нетривиальной топологией широко рассматривается как перспективная среда для спинтронных устройств, а также как перспективная платформа материаловедения для магнитной ТГц-спинтроники и энергонезависимого хранения данных [1, 2]. Используя температурные функции Грина, мы изучаем динамику спиновых волн и термодинамические свойства ферроэлектрических/ферромагнитных сверхрешеток. Магнитная подсистема описывается моделью Гейзенберга с конкурирующими ферромагнитными и антиферромагнитными обменными взаимодействиями. Магнитоэлектрическое взаимодействие учитывается на границе раздела ферроэлектрик/ферромагнетик. Получены аналитические выражения для спектров спиновых волн, а также для температурных зависимостей энергии и намагниченности отдельных слоев. Показано, что магнитоэлектрическое взаимодействие увеличивает угол отклонения спиральной структуры от равновесной конфигурации в приповерхностных областях, сдвигает поверхностные моды в законе дисперсии в высокочастотный диапазон (см. а.б. рис. 1).

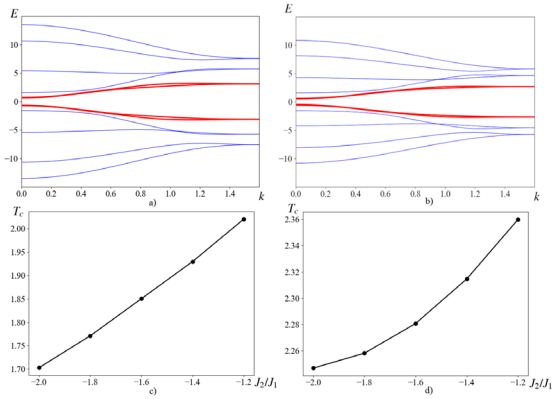


Рис. 1. Дисперсионные кривые пленки при $J_2/J_1 = -1.4$: (a) $J_{mf} = -0.1$, (b) $J_{mf} = -1.0$. Красным цветом выделены поверхностные ветви спектра, локализованные на границах, раздела с сегнетоэлектриками. Зависимость температуры перехода T_c от J_2/J_1 при (c) $J_{mf} = -0.1$, (d) $J_{mf} = -1.0$.

Мы обнаружили, что критическая температура фазового перехода монотонно уменьшается с увеличением параметра фрустрации обменных взаимодействий J_2/J_1, но увеличивается с увеличением параметра магнитоэлектрической связи и анизотропии (см. рис. 1). Кроме того, мы выявили, что квантовые флуктуации при $T = 0$ уменьшают эффективную длину спиновой волны, причем это уменьшение более выражено во внутренних слоях.

Литература

1. V.V. Ustinov, I.A. Yasyulevich, Chiral spintronics of helimagnets. Uspekhi Fizicheskikh Nauk, 2025, 195, 1062-1093.
2. A.I. Samigullina, A.G. Nugumanov, I.F. Sharafullin, Spin waves and thermodynamic properties in magnetoelectric bilayer films with skyrmion phases and in-plane Dzyaloshinskii–Moriya interaction. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 2026, 698, 131781.

АНИЗОТРОПНОЕ ПОВЕДЕНИЕ СЛОИСТОГО МАТЕРИЛА ИЗ ТИТАНОВОГО СПЛАВА ВТ20 ПРИ УДАРНОМ НАГРУЖЕНИИ

А.А. Саркеева

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа, Россия

aigul-05@mail.ru

Слоистые материалы представляет существенный интерес для исследователей в силу возможности достижения в них повышенного уровня свойств [1-4]. При этом на механическое поведение слоистого материала оказывает влияние множество факторов [1, 2]. Основные механизмы повышения ударной вязкости слоистых материалов разделяют на две категории: внутренние и внешние [5]. Внутренние механизмы определяются микроструктурой материала, а все прочие факторы, способствующие повышению ударной вязкости, относятся к внешним механизмам.

Титановый сплав ВТ20 принадлежит к классу псевдо-α-сплавов системы Ti– Al– Zr– Mo – V с гексагональной плотноупакованной (ГПУ) кристаллической решёткой. ГПУ α-фаза титана обладает выраженной анизотропией свойств, что обусловливает принципиальную зависимость механических характеристик материала от кристаллографической текстуры. Тогда как анизотропия предела прочности может составлять 5–10%, анизотропия показателей трещиностойкости – может быть выше на порядок при прочих равных условиях.

Среди множества технологических способов изготовления слоистых материалов диффузионная сварка (ДС) представляет наибольший интерес для соединения титановых заготовок. ДС совместно со сверхпластической формовкой позволяет изготавливать многослойные конструкции ответственного назначения, определяющие перспективу дальнейшего развития космической и авиационной техники.

Результаты испытаний слоистого материала из ВТ20 свидетельствуют о принципиальном различии в поведении продольных и поперечных образцов, а также образцов с различным расположением поверхностей соединения относительно направления действующей нагрузки. При распространении трещины одновременно через все слои материал характеризуется более высокими значениями ударной вязкости в поперечном направлении, чем при распространении трещины последовательно через каждый слой – в продольном направлении. Обсуждается влияние текстуры слоистого материала на его механическое поведение.

Данная работа выполнена в рамках государственного задания ИПСМ РАН (№ 124022900007-9).

Литература

1. R.W. Hertzberg. Deformation and fracture mechanics of engineering materials. WILEY, 2012. 784 p.
2. D.R. Lesuer, C.K. Syn, O.D. Sherby et al. Mechanical behaviour of laminated metal composites Int. Mater. Rev., 1996, 41(5), 169-197.
3. A.A. Sarkeeva, A.A. Kruglov. Characteristics of the mechanical behavior of a near-alpha multilayer laminate under impact loading. Lett. Mater., 2023, 13(4s) 488-492.
4. A.A. Sarkeeva, M.A. Khimich, A.A. Kruglov, Y.P. Sharkeev. Effect of interfaces on the impact fracture characteristics of diffusion-bonded magnesium alloy ML-19. Lett. Mater., 2024, 14(4) 488-494.
5. C.M. Cepeda-Jiménez, J.M. García-Infanta, M. Pozuelo et al. Scr. Mater. Impact toughness improvement of high-strength aluminium alloy by intrinsic and extrinsic fracture mechanisms via hot roll bonding. Scripta Materialia, 2009, 61(4) 407-410.

МНОГОСЛОЙНЫЕ ЯЧЕИСТЫЕ КОНСТРУКЦИИ: МЕТОДОЛОГИЯ ПРОЦЕССА СВЕРХПЛАСТИЧЕСКОЙ ФОРМОВКИ И ДИФФУЗИОННОЙ СВАРКИ

Р.В. Сафиуллин, А.Р. Сафиуллин

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
rvs@imsp.ru

Успех создания перспективной авиакосмической техники во многом определяется тем, насколько эффективно и всесторонне будут реализованы самые передовые научные достижения, прогрессивные конструкторские и производственные решения [1]. Конструкции в виде тонкостенных панелей и оболочек широко используются в летательных аппаратах, кораблестроении и ряде инженерных сооружений [2. 3]. Прочность и устойчивость таких конструкций традиционно обеспечивается либо набором продольных и поперечных подкрепляющих ребер, либо выполнением конструкций многослойными, состоящими из внешних (несущих) слоев, связанных слоем наполнителя. Связь несущих слоев с наполнителем обеспечивается с помощью паяных, сварных, клеевых и других соединений. Многослойные конструкции обладают меньшим весом, чем эквивалентные по жесткости гладкие оболочки и оболочки с подкрепляющими ребрами. Общим недостатком рассмотренных выше конструкций является пониженная технологичность. Многослойные ячеистые конструкции могут состоять из двух и более слоев соединённых между собой диффузионной сваркой. Наиболее используемыми являются конструкции, состоящие из трёх и четырёх слоёв. Такие конструкции находят применение в конструкциях летательных аппаратов в виде корпусных изделий (различных оболочек), панелей, лючков, управляющих плоскостей, а также во вращающихся частях газотурбинных двигателей - полых лопатках. На рис. 1 приведены примеры конструкций, получаемых по технологии сверхпластической формовки и диффузионной сварки (СПФ/ДС) в ИПСМ РАН.

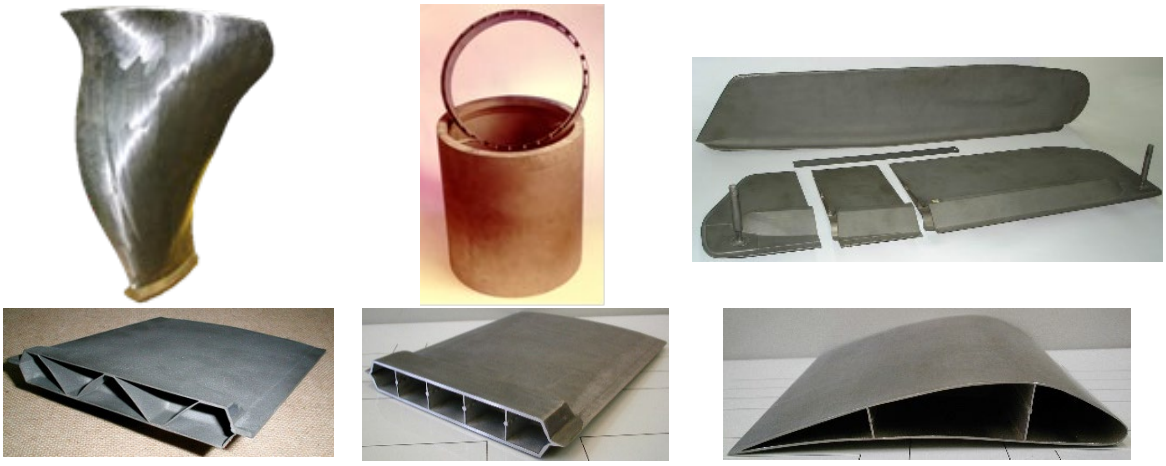


Рис.1. Примеры конструкций, получаемых по технологии СПФ/ДС в ИПСМ РАН.

Создание современной технологии получения надежных равнопрочных ячеистых конструкций невозможно без всестороннего изучения механических и эксплуатационных свойств, как самих конструкций, так и материалов, используемых для их изготовления. Исследование характеристик конструкционной прочности тонкостенных полых ячеистых изделий является важным этапом разработки надежной технологии СПФ/ДС. Наличие данных о конструкционной прочности дает ключ конструкторам к проектированию рациональных конструкций с точки зрения веса и прочности. Цель работы – разработка технологии изготовления типовых изделий авиакосмической техники.

Достижение цели осуществлялось в три этапа. На первом этапе проводилась разработка методологии исследования процесса сверхпластической формовки и диффузионной сварки. Далее разрабатывались методики и проводились исследования. На завершающем этапе осуществлялась практическая реализация проведенных исследований - разработка опытных технологий. В процессе работы была разработана «Методология процесса сверхпластической формовки и диффузионной сварки», состоящая из четырёх этапов.

Методология процесса сверхпластической формовки и диффузионной сварки

Этап 1. Исследование сверхпластического поведения материала в условиях одноосного растяжения. Определение оптимальных температурно-скоростных условий сверхпластического течения.

Этап 2. Исследование технологических свойств листовых заготовок

2.1. Исследование закономерностей сверхпластической двухосной деформации листовых материалов:

проведение тестовых формовок листовых заготовок в конусную, клиновую, прямоугольную и сферическую матрицы при постоянном давлении;

определение материальных констант, моделирование и расчет режимов формовки (давление-время);

проведение тестовых формовок по расчетному режиму СПФ и определение оптимальных режимов.

2.2. Исследование свариваемости в твердом состоянии в условиях сверхпластичности:

проведение микроструктурных исследований качества твердофазных соединений;

проведение механических испытаний твердофазных соединений.

Этап 3. Разработка технологических рекомендаций и компьютерных моделей получения сложнопрофильных конструкций методом сверхпластической формовки.

Этап 4. Проектирование и изготовление оснастки. Отработка опытного технологического процесса получения полых изделий и конструкций на уменьшенных моделях и полноразмерных образцах.

За время работы была разработана целая серия различных методик исследований, которая была использована для исследования и разработки новых технологий получения изделий авиакосмической техники.

Разработанные методики исследований

I. Методики технологических исследований процесса СПФ/ДС.

1. Методика отжига образцов в контролируемой среде.
2. Методика СПФ в цилиндрическую, коническую, прямоугольную и клиновую матрицы.
3. Методика определения степени деформации в процессах СПФ.
4. Методика исследования формирования твёрдофазного соединения (ТФС) в условиях СПФ.
5. Методика исследования процесса СПФ/ДС.

II. Методики и установки для статических испытаний многослойных конструкций

1. Методика исследования микроструктуры и механических свойств.
2. Методика испытаний на гидростатическое сжатие-растяжение.
3. Методика испытаний на сжатие с определением деформационной характеристики.
4. Методика испытаний на кручение.

III. Методики и установки для динамических испытаний многослойных конструкций

1. Методика определения усталостной прочности образцов листового материала.
2. Методика определения усталостной прочности компонентов полой лопатки.
3. Методика испытаний на баллистический удар.

IV. Методика неразрушающего контроля.

Проведенные многолетние исследования процесса СПФ/ДС в ИПСМ РАН, позволили разработать целую серию методик для оценки качества изготовления полых конструкций, их

несущей способности, механических, усталостных и технологических свойств, которые успешно опробованы и продолжают использоваться при разработке интегральных технологий.

Литература

1. А.А. Иноземцев. О программе создания авиационных газотурбинных двигателей пятого поколения семейства самолетов МС-21. Вестник Пермского Научного Центра, 2010, № 4, 28-46.
2. Е.Н. Петров, В.В. Родионов, Э.Н. Кузьмин, Р.Я. Лутфуллин, Р.В. Сафиуллин. Ячеистые конструкции. Снежинск: РФЯЦ-ВНИИТФ, 2008, 176 с.
3. Р.В. Сафиуллин. Методики и установки для статических и динамических испытаний многослойных тонколистовых ячеистых конструкций. XII Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики, Уфа, 19-24 августа 2019 года. 773-775

КАК ВАРИАБЕЛЬНОСТЬ НАЧАЛЬНЫХ КОНФИГУРАЦИЙ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ ВЛИЯЕТ НА СТРУКТУРНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ?

Н.Ю. Сдобняков, К.Г. Савина, С.В. Серов, Е.С. Митинев, А.Ю. Колосов, Д.Н. Соколов, С.С. Богданов

Тверской государственный университет, Тверь
nsdobnyakov@mail.ru

Очевидно, что для металлических наночастиц проблема получения определенной локальной структуры тесно связана со способом их синтеза. Прогностическая роль атомистического моделирования в данном случае позволяет экономить ресурсы, а также оценивать как степень возможного локального упорядочения, так и описывать сценарии сегрегации [1-3]. В данной работе метод молекулярной динамики с использованием потенциала сильной связи (см. [2, 3]) применен к четырехкомпонентным наночастицам Ni_{2400}-Co_{800}-Fe_{600}-Cu_{200} с различной начальной морфологией (см. рис. 1). Показано, что начальная конфигурация влияет на параметры гистерезиса в процессе плавления и последующей кристаллизации, а также поверхностную энергию за счет различных сценариев сегрегационного поведения компонентов. Кроме того, скорость термоиндуцированного воздействия также является одним из существенных факторов, влияющим на формирование локальной структуры.

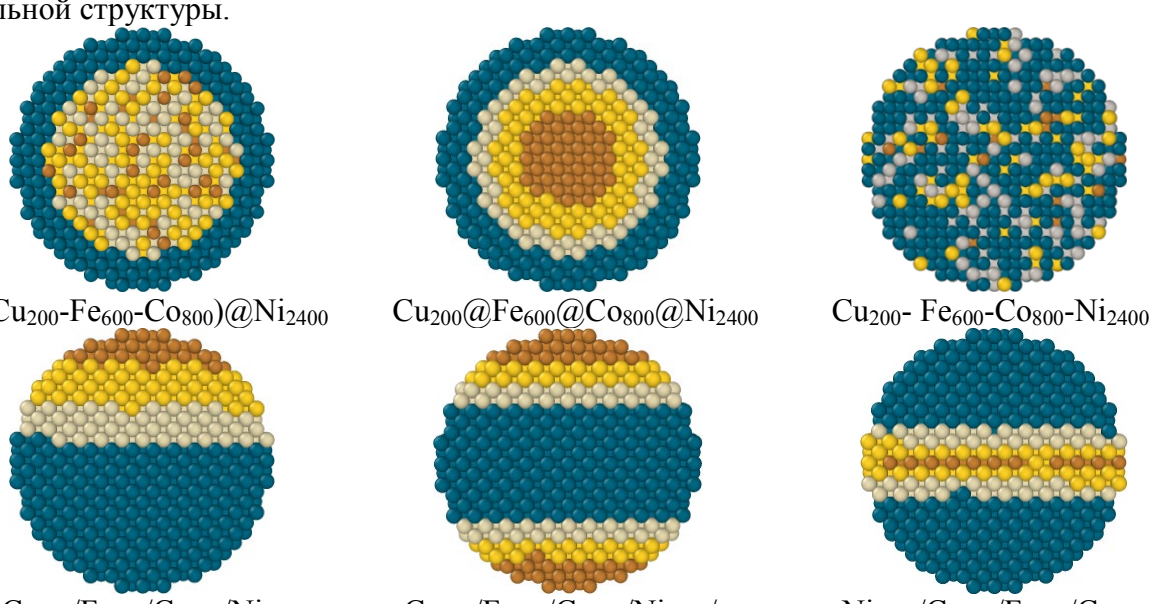


Рис. 1. Примеры начальных морфологий для наночастиц Ni2400-Co800-Fe600-Cu200. Цвета: Желтые атомы – железо, коричневые – медь, синие атомы – никель, серые – кобальт.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ в рамках государственной программы в области научно-исследовательской деятельности (проект № 0817-2026-0006).

Литература

1. Н.Ю. Сдобняков Моделирование структурных превращений в однокомпонентных и многокомпонентных металлических наносистемах: учебник. Тверь: ТвГУ, 2025. 408 с.
2. А.Ю. Колосов, К.Г. Савина, Д.Н. Соколов и др. Структура четырехкомпонентных наносплавов Ni-Cu-Fe-Co при термоиндуцированном воздействии: атомистическое моделирование. Физ.-хим. асп. изуч. класт. наностр. и наномат., 2025, 17 674-686.
3. A.Yu. Kolosov, N. Nepsha, D. Sokolov et al. ACS Phys. Chem. Au, 2025, 6 (1) 163-173.

УПРАВЛЕНИЕ СТРУКТУРОЙ И СВОЙСТВАМИ СТАЛИ 08Х18Н10Т ПРИ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНОМ ПРЯМОМ ЛАЗЕРНОМ ВЫРАЩИВАНИИ КРУПНОГАБАРИТНЫХ ИЗДЕЛИЙ

А.О. Сидоренко, А.В. Дмитриева, А.А. Блохин, С.В. Жеребцов

Санкт-Петербургский Государственный морской технический университет, Санкт-Петербург
sidorenko@ilwt.smtu.ru

Переход к высокопроизводительным режимам аддитивного выращивания крупногабаритных изделий (например, выгородок внутрикорпусных устройств энергетических реакторов) сдерживается отсутствием нормативной базы и инженерных методик оценки влияния режимов на эксплуатационные свойства. Основной проблемой при увеличении производительности аддитивного процесса является расширение зоны термического влияния и перегрев, ведущие к изменению морфологии структуры и образованию дефектов.

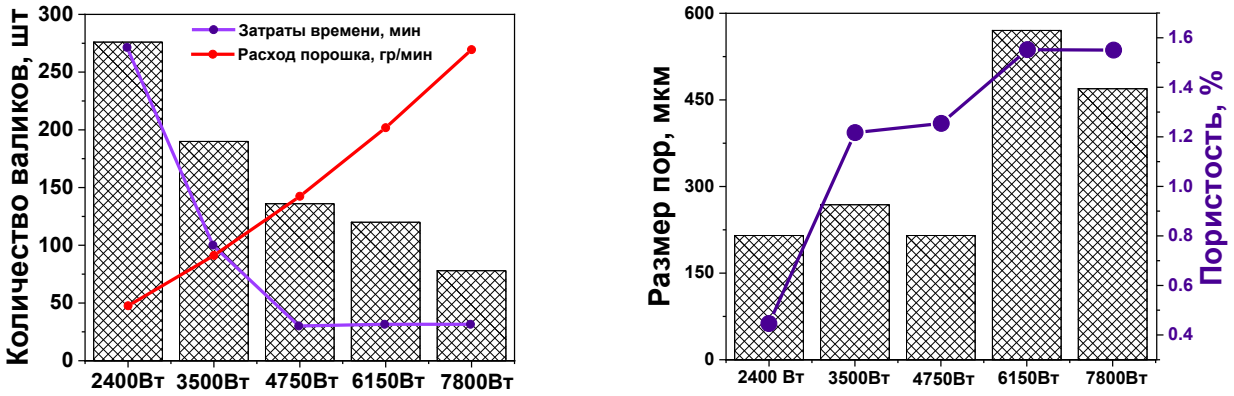
Исследование технологических параметров процесса прямого лазерного выращивания (ПЛВ) показывает, что варьирование энерговвода позволяет гибко управлять плотностью, пористостью и макроструктурой синтезируемого металла, формируя необходимый задел для создания промышленных аддитивных регламентов [1]. Однако при переходе на повышенные мощности подводимой теплоты ключевой проблемой становится термический цикл ПЛВ. Избыточный энерговвод непосредственно провоцирует значительные изменения микроструктуры, которые критически сказываются на комплексе свойств получаемого материала [2]. Кроме того, высокая скорость охлаждения и специфика теплоотвода при ПЛВ напрямую определяют характерные размеры структурных составляющих; снижение темпа охлаждения при перегреве ведет к укрупнению зерна и падению предела прочности [3].

Целью работы является выявление оптимальных режимов высокопроизводительного прямого лазерного выращивания (ПЛВ), обеспечивающих требуемый комплекс механических и эксплуатационных свойств стали. В качестве материала исследования использована сталь марки 08Х18Н10Т.

Эксперименты проводились в диапазоне мощностей лазера от 2400 до 7800 Вт при постоянной скорости 25 мм/с и вариации диаметра пятна 2.5-4.5 мм. Расчетная энергия ввода поддерживалась на уровне одном уровне. Комплекс исследований включал металлографию, рентгенофазовый анализ (XRD), сканирующую электронную микроскопию (SEM), механические испытания на растяжение и твердость (HBW), а также расчет остаточных напряжений.

Установлено, что повышение мощности до 6150-7800 Вт позволяет увеличить производительность на 50–70% по сравнению с базовыми значениями (2400 Вт), что видно по графику на рис. 1а. С ростом мощности выявлен рост объемной пористости с 0.44% до 1.55% (рис. 1б). Однако в оптимальном диапазоне (4750-6150 Вт) плотность материала сохраняется на высоком уровне (>98.5%), а несплавления полностью отсутствуют.

Увеличение мощности лазера приводит к снижению скорости охлаждения и, как следствие, к укрупнению зерна с 15-25 мкм до 35-55 мкм. По данным рентгеновской дифракции, при высоких мощностях (7800 Вт) наблюдается активизация образования вторичных карбидных фаз (TiC, $Cr_{23}C_6$), что подтверждает изменение термической истории. Чрезмерный перегрев ведет к локальному формированию неравновесных фаз. Рост пористости и карбидных фаз выступает лимитирующим фактором, ограничивающим максимальную мощность.



а б

Рис. 1. Зависимость расхода порошка и затрат времени от мощности лазерного излучения (а) и зависимость пористости образцов от мощности лазерного излучения (б)

Сравнительный анализ механических свойств (рис. 2) показал закономерное снижение предела прочности ($\sigma_в$) и твердости с ростом мощности. Однако в диапазоне 4750-6150 Вт свойства стабилизируются и строго соответствуют техническим требованиям ($\sigma_{0.2}$ = 296-315 МПа, δ = 62–71%). Применение данных режимов позволяет гарантировать требуемые характеристики для крупногабаритных изделий ответственного назначения.

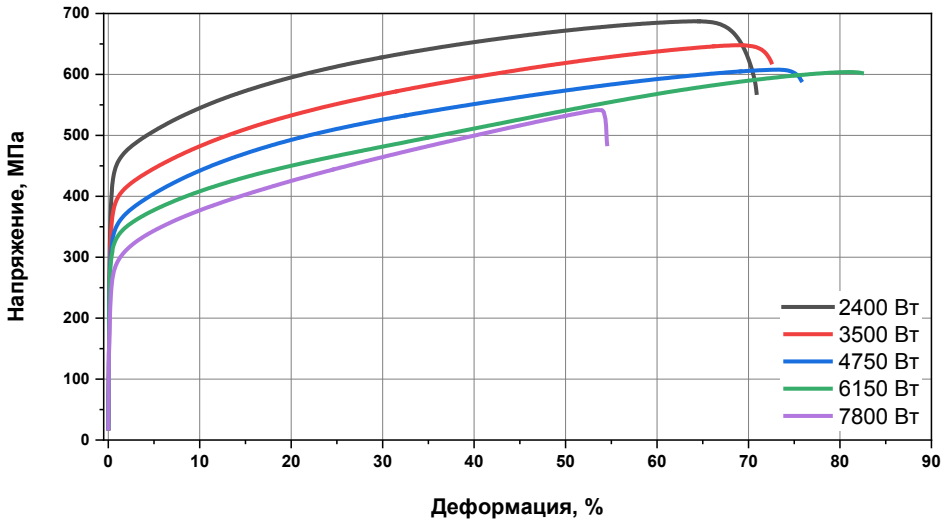


Рис. 2. Механические свойства образцов, полученных с разной мощностью лазерного излучения

Результаты работ показывают, что количественные границы высокопроизводительного режима ПЛВ стали 08Х18Н10Т находятся в диапазоне мощностей 4750–6150 Вт, обеспечивающих прирост производительности процесса на 50–70%.

Лимитирующим технологическим фактором при превышении мощности лазера свыше 6150 Вт является падение скорости охлаждения, индуцирующее рост объемной пористости до критических 1.55% и интенсификацию выделения вторичных карбидов $Cr_{23}C_6$ и TiC.

Укрупнение структурных элементов (зерна) с 15–25 мкм до 35–55 мкм приводит к снижению предела прочности, однако в границах оптимального «технологического окна» (4750–6150 Вт) уровень механических свойств стабилизируется и полностью удовлетворяет конструктивным требованиям к изделиям ответственного назначения

Благодарности

Исследование выполнено при финансовой поддержке стратегической программы академического лидерства «Приоритет-2030» (соглашение № 075-15-2026-078, проект «Цифровые промышленные технологии»).

Литература

1 В.В. Бобырь и др. Исследование влияния параметров прямого лазерного выращивания на структуру и свойства высокопрочной нержавеющей стали марки 08Х14НДЛ. Вопросы материаловедения, 2025, 4(120), 59-68.

2 T. Das et al. Advancement in Laser-Based Directed Energy Deposition of Stainless Steel on Microstructural Changes in Mechanical and Wear Properties. Steel research international, 2025, 96, 6 2400548.

3 A.N. Alexandrova, I.V. Shishkovsky Effect of Direct Laser Deposition on Microstructure and Mechanical Properties of Stainless Steel. Физика металлов и металловедениею, 2019, 120, 512–521.

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ РКУП НА ЭВОЛЮЦИЮ НАНОРАЗМЕРНЫХ КАРБИДОВ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МАЛОУГЛЕРОДИСТОЙ СТАЛИ 10

В.Д. Ситдиков[1, 2], **А.В. Малинин**[1]

[1]*Филиал ООО «РН-ГИР» в городе Уфе – БашНИПИнефть, Уфа*
[2]*Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа*
SitdikovVD@RN-GIR.rosneft.ru

В работе установлена взаимосвязь между температурными режимами проведения равноканального углового прессования (РКУП) и эволюцией преципитатов в низкоуглеродистой стали 10. Показано, что эволюция механического поведения стали при различных температурах РКУП определяется действием различных конкурирующих механизмов деформационного упрочнения и динамическим старением. Основное внимание в докладе уделено анализу изменения формы частиц и их содержания с использованием интегрального метода малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) вместе с данными рентгенофазового и электронно-микроскопического анализов. Найдено, что режим РКУП, реализованный при температуре 200 °С, приводит к формированию ультрамелкозернистой (УМЗ) структуры в стали и достижению высокого предела прочности с удовлетворительной пластичностью. Установлено, что повышение механических свойств объясняется механизмом зернограничного упрочнения, частичным растворением частиц цементита и выпадением шарообразных преципитатов $Me_{23}C_6$ и Me_3C_2 типов. Установлено, что повышение температуры до 600 °С РКУП инициирует сфероидизацию частиц цементита и выпадение более крупных сферических частиц $Me_{23}C_6$ и Me_3C_2 типов (рис. 1).

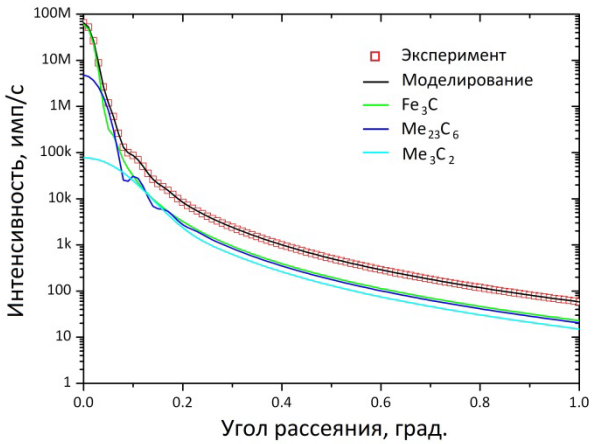


Рис. 1. Экспериментальные и смоделированные МУРР кривые. Сталь 10.

Сделан вывод о том, что изменение морфологии частиц на преимущественно сферические обеспечивают увеличение пластичности в УМЗ стали до 36,5% при сохранении прочности на уровне 671 МПа при РКУП 600 °С. Анализ механизмов упрочнения состояния стали после РКУП 600 ºС согласно полученным данным свидетельствует о преобладании механизма дисперсионного твердения над зернограничным упрочнением. Экспериментально установленные МУРР зависимости между формой и размерного распределения выделений с прочностными свойствами стали 10 позволяют оптимизировать режимы получения УМЗ заготовок сталей.

СТАБИЛИЗАЦИЯ УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОЙ СТРУКТУРЫ В СПЛАВЕ АА2219 ПРИ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОМ РАВНОКАНАЛЬНОМ УГЛОВОМ ПРЕССОВАНИИ ДО ЭКСТРЕМАЛЬНО ВЫСОКОЙ НАКОПЛЕННОЙ ДЕФОРМАЦИИ

О.Ш. Ситдиков, О.Э. Латыпова

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
sitdikov.oleg@imsp.ru

Исследована эволюция микроструктуры промышленного алюминиевого сплава АА2219 (система Al–Cu с добавками Zr, Mn, Cr) при равноканальном угловом прессовании (РКУП) при 300°С до высокой накопленной деформации e = 16. Показано, что деформация после e = 8–12 приводит не к продолжению измельчения зерна, а к выходу на режим насыщения и формированию стабильного ультрамелкозернистого (УМЗ) состояния. Характерными параметрами этого состояния являются: средний размер мелких зерен ≈2.4–2.5 мкм, доля высокоугловых границ ≈65% и интенсивная текстура простого сдвига с компонентами {111}<110> и {112}<110>.

Методами дифракции обратно рассеянных электронов (EBSD) и просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) установлено, что ключевую роль в стабилизации УМЗ-структуры играют наноразмерные дисперсоиды (алюминиды Zr, Mn, Cr размером 20–100 нм), равномерно распределенные по границам зерен и субзерен. Дисперсоиды реализуют два взаимосвязанных механизма. Во-первых, они подавляют динамический возврат, препятствуя перестройке и аннигиляции дислокаций, что обеспечивает накопление энергии и трансформацию малоугловых границ в высокоугловые. Во-вторых, они эффективно препятствуют миграции межкристаллитных границ (эффект Смита–Зинера), предотвращая дальнейший рост зерен и переход системы в динамически равновесное состояние. При этом в процессе РКУП кинетика изменения объема (доли) структуры, вовлеченной в трансформацию, была существенно выше, чем кинетика накопления разориентировки границ.

Особое внимание уделено анализу распределения разориентировок межкристаллитных границ. При 300°С (0.65 от температуры плавления чистого алюминия) классическим ожиданием является формирование рекристаллизованной и/или полностью разориентированной структуры, подчиняющейся распределению Маккензи (средняя разориентировка границ ≈42°, максимум при ≈45°) [1]. Вместо этого в сплаве АА2219 после e = 16 наблюдается квазистационарное распределение с четким пиком при ≈54° и остаточным пиком малоугловых границ (Θ<15°). Такая форма распределения характерна для некоторых чистых ГЦК-кристаллов (например, меди [2]), деформированных при криогенных температурах, где термически активируемые процессы в значительной мере подавлены. В представленной работе аналогичный эффект был достигнут при повышенной температуре исключительно за счет действия выделений (главным образом, дисперсоидов). Это однозначно доказывает, что наноразмерные выделения способны полностью блокировать термически-активируемую эволюцию границ зерен и фиксировать структуру в состоянии, далеком от равновесного (маккензиевского) состояния. В достигаемых условиях эволюция структуры может продолжаться крайне медленно, выходя за пределы обычных пределов насыщения, поэтому мы не можем полностью исключить возможность дальнейшего слабого измельчения зерен. Однако в практических целях структуру при e = 16 можно считать стабилизированной.

Таким образом, показано, что в дисперсионно-упрочненных алюминиевых сплавах существует предельная деформационная стабилизация УМЗ-структуры, определяемая не величиной накопленной деформации, а архитектурой (морфологией) дисперсоидного упрочнения (размером, распределением и термической стабильностью частиц). Полученные

результаты могут иметь фундаментальное значение для понимания пределов измельчения зерна при интенсивной пластической деформации и открывают возможности для контролируемого получения термически стабильных УМЗ-материалов.

Благодарности

Исследование выполнено в рамках государственного задания ИПСМ РАН. Работы проведены на базе Центра коллективного пользования ИПСМ РАН «Структурные и физико-механические исследования материалов».

Литература

1. J.K. Mackenzie, Second paper on statistics associated with the random disorientation of cubes, Biometrika, 45 (1958) 229–240. https://doi.org/10.1093/biomet/45.1-2.229.
2. C. Kobayashi, T. Sakai, A. Belyakov, H. Miura, Ultrafine grain development in copper during multidirectional forging at 195 K. Phil. Mag. Let., 2007, 87(10) 751-766. http://dx.doi.org/10.1080/09500830701566016

СТРУКТУРА И МИКРОМЕХАНИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ АУСТЕНИТНОЙ Cr-Ni СТАЛИ, ПОДВЕРГНУТОЙ ОБРАБОТКАМ СКОЛЬЗЯЩИМ ИНДЕНТОРОМ ИЗ СИНТЕТИЧЕСКОГО АЛМАЗА

П.А. Скорынина[1], А.В. Макаров[1, 2], В.П. Кузнецов[2, 3], А.С. Скоробогатов[3], А.С. Юровских[3]

[1]*Институт машиноведения имени Э.С. Горкунова УрО РАН, Екатеринбург*
[2]*Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург*
[3]*Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург*
polina.skorynina@mail.ru

Обработки скользящими инденторами являются эффективными способами деформационного упрочнения поверхности аустенитных нержавеющих сталей [1, 2]. В настоящей работе продемонстрирована возможность применения индентора из синтетического алмаза при реализации технологии наноструктурирующего выглаживания в условиях промышленного производства. Выглаживание реализовано на токарно-фрезерном центре в воздушной среде для заготовки из стали 04Х17Н10М2Т. Кроме того, проведен сравнительный анализ с фрикционной обработкой в лабораторных условиях.

Наноструктурирующее выглаживание обеспечивает повышенный уровень микротвердости поверхности аустенитной стали (825 HV 0,025) по сравнению с фрикционной обработкой в лабораторных условиях (710 HV 0,025). Это может быть обусловлено повышенной кратностью воздействия индентором на поверхность вследствие меньшей величины подачи (соответственно 0,01 мм и 0,05 мм) и большей скоростью обработки скольжения индентора (10 м/мин при обработке на токарно-фрезерном центре и 3 м/мин при фрикционной обработке).

Выглаживание позволяет создать качественную поверхность стали 04Х17Н10М2Т с параметром шероховатости Ra = 80-130 нм. В тонком приповерхностном слое формируется нано- и субмикрокристаллическая аустенитно-мартенситная структура, при этом объемная доля мартенсита деформации не превышает 20 %. При фрикционной обработке количество мартенсита деформации достигает 60 об.%. Соответственно особенностью наноструктурирующего выглаживания является стабилизация аустенита к деформационному превращению, что может быть обусловлено нагревом при чистовом точении (операция, предшествующая выглаживанию) и нагревом в процессе выглаживания при повышенной скорости и малой подаче.

По данным инструментального индентирования наноструктурирующее выглаживание по сравнению с закалкой и чистовым точением способствует повышению прочностных характеристик (твердости вдавливания при максимальной нагрузке H_{IT} и твердости по Мартенсу HM), а также характеристик сопротивления поверхностного слоя стали 04Х17Н10М2Т упругому и пластическому деформированию.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИМАШ УрО РАН по теме № 124020600045-0, государственного задания Минобрнауки России для ИФМ УрО РАН и соглашения с Министерством науки и высшего образования РФ 075-03-2026-220 от 16.01.2026 (код шифр FEUZ-2024-0020).

Литература

1 В.П. Кузнецов, А.В. Макаров, А.С. Скоробогатов, П.А. Скорынина, С.Н. Лучко, В.А. Сирош, Н.М. Чекан. Влияние нормальной силы на сглаживание и упрочнение поверхностного слоя стали 03Х16Н15М3Т1 при сухом алмазном выглаживании сферическим индентором. Обработка металлов (технология, оборудование, инструменты), 2022, 24(1) 6-22.

2 P.A. Skorynina, A.V. Makarov, R.A. Savrai. Substantiating the process parameters of frictional treatment with a sliding indenter for an austenitic chromium-nickel steel. Tribol. Lett., 2024, 72(9).

ИНТЕРФЕЙСЫ ГИБРИДНАЯ УГЛЕРОДНАЯ ПЛЕНКА/ОКСИД МЕТАЛЛА: ОСОБЕННОСТИ СТРОЕНИЯ И ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

М.М. Слепченков[1], В.В. Шунаев[1], П.В. Барков[1], А.В. Куксин[2], А.Ю. Герасименко[2, 3], О.Е. Глухова[1, 2]

[1]*Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского, Саратов*
[2]*Первый Московский государственный медицинский университет имени И.М. Сеченова (Сеченовский Университет), Москва*
[3]*Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники», Москва*
slepchenkovm@mail.ru

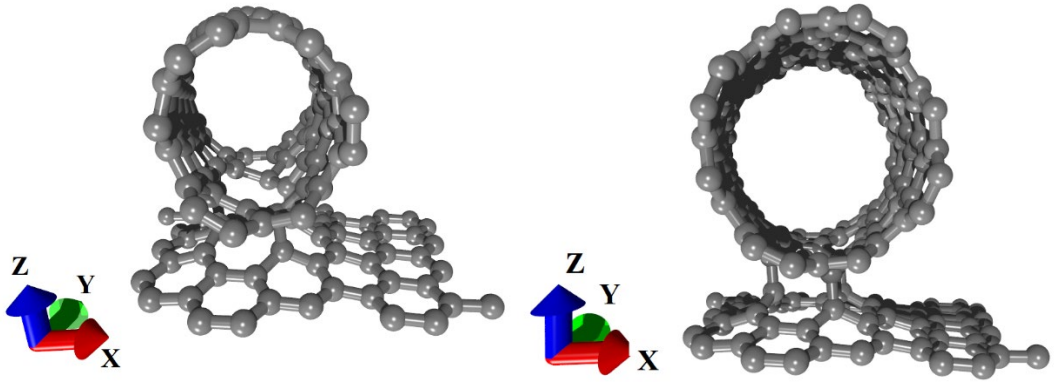
Благодаря своим структурным и физическим свойствам углеродные нанотрубки (УНТ) и графен являются объектом многих фундаментальных и прикладных исследований на протяжении десятков лет [1]. Успешные попытки синтеза гибридного углеродного наноматериала на основе УНТ и графена стимулировали развитие исследований, направленных на выявление свойств и поиск потенциального применения графен-нанотрубных гибридов [2]. В синтезируемых гибридных углеродных наноматериалах графен обеспечивает платформу с большой площадью поверхности для равномерного распределения нанотрубок, которые, в свою очередь, служат разделителями графеновых листов, препятствуя их агрегации. Кроме того, графен обеспечивает проводимость полностью углеродного гибрида в плоскости, тогда как нанотрубки – проводимость в аксиальном направлении. Различают три общих типа архитектуры гибридных углеродных наноматериалов графен–УНТ: в архитектуре первого типа УНТ ориентированы параллельно плоскости графена, в архитектуре второго типа – перпендикулярно плоскости графена и в архитектуре третьего типа – УНТ обернуты графеном [3]. Наиболее распространены представители гибридных углеродных наноматериалов графен–УНТ первого типа, в которой слои графена и УНТ располагаются в одной плоскости и связаны между собой либо силами Ван-дер-Ваальса, либо ковалентными связями. На основе гибридов графен-УНТ с горизонтально ориентированными нанотрубками создаются такие устройства, как нанотранзисторы, фотодетекторы, суперконденсаторы, сенсоры [4]. Используя методы атомистического моделирования, в данной работе проводится прогностический анализ влияния оксидов металлов на электронно-энергетические и электропроводные характеристики гибридных углеродных квази-2D пленок, образованных листом графена и ковалентно соединенными с ним одностенными УНТ (ОУНТ). В качестве оксидов металлов рассматриваются наночастицы оксида алюминия Al_2O_3, оксида титана TiO_2 и оксида гафния HfO_2.

Расчеты атомной конфигурации и электронно-энергетических характеристик исследуемых структур проводились в рамках метода функционала плотности в схеме сильной связи с самосогласованным вычислением заряда SCC-DFTB [5]. Электрическая проводимость G рассчитывалась в рамках формализма Ландауэра-Буттикера [6] для направления токопереноса вдоль оси нанотрубок согласно формуле

$$G = \frac{2e^2}{h}\int_{-\infty}^{\infty} T\,(E)F_T(E - E_F)dE, \qquad (1)$$

где $T(E)$ – функция пропускания электронов, E_F — энергия Ферми материала контактов, к которым подсоединен исследуемый объект, e — заряд электрона, h — постоянная Планка, $2e^2/h$ – удвоенное для учета спина значение кванта проводимости. Электрическое сопротивление R определялось как величина, обратная электрической проводимости. Все расчеты выполнялись при температуре 300 К.

Прогностические исследования проводились для двух типов суперъячеек гибридных углеродных пленок: графен-ОУНТ (6,3) и графен-ОУНТ (8,4) с расстоянием между соседними ОУНТ ~1.3 нм. Построенные суперъячейки с равновесными геометрическими параметрами приведены на рис. 1. В рамках метода SCC-DFTB проводилось моделирование осаждения оксидов металла на поверхность гибридной углеродной пленки для формирования интерфейсов графен-ОУНТ/оксид металла. Рассматривалось осаждение как отдельных кластеров наночастиц, так и сформированного из них слоя. Для расчетов были выбраны ячейки Al_2O_3 кубической сингонии с пространственной группой Fd^-3m (кластер из 40 атомов), TiO_2 тетрагональной сингонии с пространственной группой $I4_1/amd$ (кластер из 36 атомов) и HfO_2 моноклинной сингонии с пространственной группой $P2_1/c$ (кластер из 44 атомов) из базы данных Materials Project (https://next-gen.materialsproject.org/). Выбранные ячейки соответствуют известным экспериментальным данным о кристаллографических особенностях Al_2O_3, TiO_2 и HfO_2.



а б

Рис. 1. Суперъячейки гибридной углеродной квази-2D пленки, образованной ковалентно связанными графеном и одностенными углеродными нанотрубками с индексами хиральности (6,3) (а) и (8,4) (б) после оптимизации атомной сетки

Получены суперъячейки интерфейсов графен-ОУНТ/оксид металла (Al_2O_3, TiO_2, HfO3), характеризующимися наибольшей по модулю величиной энергии связи E_b, определяемой как разность полной энергии интерфейса графен-ОУНТ/оксид металла и суммарной полной энергии его составных частей (гибрида графена-ОУНТ и оксида металла). Оптимальными по энергии являются варианты размещения отдельных кластеров оксидов металла как в пространстве между ОУНТ (здесь и далее вариант 1), так и над поверхностью ОУНТ (вариант 2). Для интерфейсов графен-ОУНТ/Al_2O_3: для структуры графен-ОУНТ (6,3) E_b ~ -2.2 эВ в случае варианта 1 и E_b ~ -2 эВ в случае варианта 2; для структуры графен-ОУНТ (8,4) E_b ~ -2.3 эВ и ~ -1.7 эВ для вариантов 1 и 2 соответственно. Для интерфейсов графен-ОУНТ/TiO_2: для структуры графен-ОУНТ (6,3) E_b ~ -5 эВ для варианта 1 и ~ -6.7 эВ для варианта 2, для структуры графен-ОУНТ (8,4) значения E_b составили ~ -5.9 эВ и ~ -7.1 эВ соответственно. Для интерфейсов графен-ОУНТ/HfO_2: для структуры графен-ОУНТ (6,3) E_b ~ -13 эВ для варианта 1 и ~ -11.8 эВ для варианта 2, для структуры графен-ОУНТ (8,4) Eb составили ~ -13.9 эВ и ~ -10.9 эВ соответственно. При объединении отдельных кластеров оксидов металла в слой величина E_b возрастает в ~10 раз для интерфейса графен-ОУНТ/Al_2O_3 связи, в ~3-4 раза для интерфейса графен-ОУНТ/TiO_2 и в ~2-3 раза для интерфейса графен-ОУНТ/HfO_2.

Рассчитаны значения сопротивлений интерфейсов графен-ОУНТ/оксиды металлов. Полученные результаты обнаружили зависимость электрического сопротивления *R* от вариантов расположения кластеров наночастиц оксидов металлов. Для интерфейсов графен-ОУНТ/Al_2O_3 и графен-ОУНТ/TiO_2 величина сопротивления для варианта 1 (R_1) меньше в ~ 1.3-1.4 раза, чем для варианта 2 (R_2): R_1 ~ 35 кОм и R_2 ~ 49 кОм для интерфейса графен-ОУНТ(6,3)/Al_2O_3, R_1 ~ 39 кОм и R_2 ~ 55 кОм для интерфейса графен-ОУНТ(8,4)/Al_2O_3, R_1 ~

25 кОм и R_2 ~ 41 кОм для интерфейса графен-ОУНТ(6,3)/TiO_2, R_1 ~ 24 кОм и R_2 ~ 33 кОм для интерфейса графен-ОУНТ(8,4)/TiO_2. Для интерфейса графен-ОУНТ/HfO_2 сопротивление R_1 ~ 5-7% больше сопротивления R_2: R_1 ~ 21 кОм и R_2 ~ 20 кОм для интерфейса графен-ОУНТ(6,3)/HfO_2, R_1 ~ 13.4 кОм и R_2 ~ 12.6 кОм для интерфейса графен-ОУНТ(8,4)/HfO_2.

По итогам численных исследований определено, что оптимальным с позиции наибольшего значения величины энергии связи E_b и наименьшей величины сопротивления *R* является интерфейс ВОГ-ОУНТ/HfO_2, при формировании которого предпочтительнее использовать полупроводниковые нанотрубки.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-79-10316.

Литература

1 M.V. Kharlamova, C. Kramberger, A.I. Chernov. Advanced Carbon Nanostructures: Synthesis, Properties, and Applications. Nanomaterials, 2023, 13(7s), 1268.
2 W. Du, Z. Ahmed, Q. Wang, C. Yu, Z. Feng, G. Li, M. Zhang, C. Zhou, R. Senegor, C.Y. Yang. Structures, properties, and applications of CNT-graphene heterostructures. 2D Mater., 2019, 6(4s), 042005.
3 B. Liu, J. Sun, J. Zhao, X. Yun. Hybrid graphene and carbon nanotube-reinforced composites: polymer, metal, and ceramic matrices. Hybrid Mater., 2025, 8, 1.
4 S. Pyo, Y. Eun, J. Sim, K. Kim, J. Choi. Carbon nanotube-graphene hybrids for soft electronics, sensors, and actuators. Micro and Nano Syst. Lett., 2022, 10, 9.
5 M. Elstner, D. Porezag, G. Jungnickel, J. Elsner, M. Haugk, Th. Frauenheim, S. Suhai, G. Seifert. Self-consistent-charge density-functional tight-binding method for simulations of complex materials properties. Phys. Rev. B, 1998, 58(11s), 7260-7268.
6 S. Datta. Quantum Transport: Atom to Transistor. Cambridge University Press: Cambridge, London, UK, 2005. 404 p.
7 В.В. Рыбин. Большие пластические деформации и разрушение металлов. М.: Металлургия, 1986. 224 с.

ФОРМИРОВАНИЕ МЕЖФАЗНОГО СЛОЯ В СТЕКЛОПЛАСТИКЕ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ДАВЛЕНИЯХ ОТВЕРЖДЕНИЯ

А.С. Смирнов, Е.О. Смирнова, В.С. Канакин

Институт машиноведения им. Э.С. Горкунова УрО РАН, Екатеринбург
smirnov@imach.uran.ru

Исследование параметров межфазной зоны в полимерно-матричных композитах имеет важное значение для корректного прогнозирования их прочности и надежности. Межфазная зона представляет собой промежуточный слой между матрицей и волокном, обладающий нано- или микрометровой толщиной. Этот слой перераспределяет напряжения от матрицы к жестким волокнам. Управление свойствами межфазной зоны можно рассматривать как способ для улучшения упругих и прочностных свойств композитов.

Свойства композитных материалов существенно зависят от технологических параметров процесса отверждения связующего, таких как внешнее давление и температура. Известно, что повышение давления отверждения способствует увеличению плотности полимерной сети матрицы, что должно приводить к улучшению характеристик материала. Тем не менее, влияние давления на свойства межфазной зоны остается малоизученным. Это связано со сложностью определения характеристик этой зоны. Прямое исследование межфазного слоя затруднено из-за его малых размеров. Определение толщины требует применения высокоразрешающих методов, таких как динамическая силовая микроскопия. В то же время, определение локальных упругих свойств (модуля Юнга и коэффициента Пуассона) основывается на вычислительных подходах. Целью настоящей работы является исследование влияния внешнего давления при отверждении связующего на формирование толщины межфазной зоны и ее локальных упругих свойств в стеклопластиковом композите.

Объектом исследования выступал монослой стеклопластикового композита, состоящий из эпоксидной матрицы и направленных стеклянных волокон микронного диаметра. Процесс отверждения связующего проводился при температуре 125 °C под действием внешнего давления: 0, 0.6, 1, 2 и 10 МПа. Были получены пять серий образцов. Определение толщины межфазной зоны проводилось с использованием динамической силовой микроскопии. Измерения проводились на атомно-силовом микроскопе NT-206. Подготовка поверхности осуществлялась методом травления пучком ионов аргона, что позволило избежать образования механического наклепа. При этом срез композита выполнялся под углом 30 градусов к поверхности волокон с целью предотвращения перепада высот между армирующим наполнителем и матрицей. Упругие свойства структурных компонентов оценивались методом инструментального наноиндентирования. Испытания проводились с использованием наноиндентора Hysitron TI950 с пирамидкой Берковича. Для матрицы нагрузка составляла 5 мН, а для стеклянных волокон – 10 мН.

Для определения модуля Юнга и коэффициента Пуассона межфазного слоя была разработана вычислительная мезомеханическая модель. Модель представляла собой представительный объем, содержащий случайное распределение волокон, матрицу и межфазные слои. Геометрия задавалась на основе экспериментальных данных. Задавая различные значения упругих констант для межфазного слоя и сопоставляя результаты с макроскопическими свойствами монослоя, были вычислены упругие характеристики межфазной зоны при различных давлениях отверждения.

Результаты микроскопических исследований продемонстрировали влияние давления отверждения на геометрические характеристики межфазной зоны. Было установлено, что при свободном отверждении без приложения избыточного давления (0 МПа) толщина межфазного слоя составляет в среднем 1232 ± 95 нм. По мере увеличения давления отверждения наблюдается сокращение этого параметра: при 0.6 МПа толщина снижается до 950 ± 75 нм, при 1 МПа – до 898 ± 76 нм, при 2 МПа – до 713 ± 52 нм. Повышение давления

до 10 МПа приводит к уменьшению толщины до 212 ± 71 нм. Данная зависимость носит экспоненциальный характер. Причиной может служить то, что высокое давление уплотняет полимерную сетку, ограничивая свободный объем и подавляя диффузию молекул аппрета с поверхности стекловолокна в объем матрицы во время отверждения. В результате зона перемешивания становится более узкой [1].

Микромеханические испытания позволили определить упругие константы компонентов. Для стеклянных волокон модуль Юнга составил 89.8 ± 7.8 ГПа. Свойства матрицы оказались чувствительными к давлению отверждения. Модуль упругости матрицы возрос с 5.59 ± 0.21 ГПа (при 0 МПа) до 6.85 ± 0.29 ГПа (при 10 МПа). Увеличение модуля упругости матрицы объясняется уменьшением микропористости и увеличением плотности сшивки под воздействием сжимающих напряжений.

Применение вычислительной мезомеханической модели позволило извлечь данные об упругих свойствах межфазной зоны. Было установлено, что модуль Юнга межфазного слоя возрастает с увеличением давления отверждения. В диапазоне давлений от 0 до 2 МПа модуль упругости межфазной зоны увеличивается с 6.3 ГПа до 7.9 ГПа (при 0.6 МПа он составил 6.5 ГПа, а при 1 МПа – 6.8 ГПа). Модуль упругости межфазной зоны при всех рассмотренных давлениях превышает модуль упругости матрицы. Это свидетельствует о формировании более жесткого переходного слоя, что связано с влиянием поверхности стекловолокна, ограничивающего подвижность полимерных цепей.

Было обнаружено, что внешнее давление отверждения практически не оказывает влияния на коэффициент Пуассона межфазной зоны, который остается низким и находится в диапазоне 0.18–0.20 для всех образцов. Значения коэффициента Пуассона для межфазной зоны оказались ниже, чем у полимерной матрицы, равного 0.33.

Литература

1. А.С. Смирнов, Е.О. Смирнова, В.С. Канакин, И.А. Спирина. Влияние внешнего давления при отверждении связующего в стеклопластиковом композите на толщину и упругие свойства межфазной зоны. Физическая мезомеханика, 2026, 29(3) 28-47.

ПЕРСПЕКТИВНЫЕ РАЗРАБОТКИ ИМАШ УРО РАН В ОБЛАСТИ КОНСТРУИРОВАНИЯ МАТЕРИАЛОВ И ТЕХНОЛОГИЙ

С.В. Смирнов, В.П. Швейкин

Институт машиноведения имени Э.С. Горкунова УрО РАН, Екатеринбург
svs@imach.uran.ru

Институт машиноведения Уральского отделения РАН был создан в феврале 1986 г. как Уральский филиал Института машиноведения им. А.А. Благонравова АН СССР, а в феврале 1988 г. стал самостоятельным институтом Уральского отделения РАН. Область компетенции Института: проведение междисциплинарных исследований по разработке научных основ диагностики и ресурса материалов и конструкций, прогнозирования и управления их состоянием в течение всего жизненного цикла изделий от изготовления до решения о выводе из эксплуатации, создание на этой основе новых эффективных технологий обработки конструкционных материалов, машин и элементов конструкций, систем их управлением. Основные направления научной деятельности Института: механика деформируемых тел, перспективных материалов и технологий, конструкций и сооружений; автоматизированные системы измерения, неразрушающего контроля и диагностики ресурса машин; создание основ алгоритмического, программного и аппаратного обеспечения систем автоматического управления сложными объектами; механика и процессы управления транспортных и тяговых машин.

В структуру Института входят 12 научных лабораторий и секторов, многие из которых имеют технологическую направленность, в том числе Молодёжная лаборатория технологии материалов, созданная в рамках национального проекта «Наука и университеты» в 2024 г. и выполняющая исследования в области влияния режимов термомеханической обработки на особенности формирования структуры и комплекса свойств перспективных металлических материалов.

В последние годы в Институте интенсивно развивается направление, связанное с моделированием, конструированием и технологиям изготовления различных композиционных материалов: слоистых и матричных металлических, полимерных и гибридных композитов. Для решения задач конструирования и моделирования поведения композитов в условиях технологической обработки и эксплуатации используется и развивается иерархический подход. Принципиально новым при таком подходе является оценка прочности и рисков разрушения на разных масштабно-структурных уровнях конструкции и материала. Для этого сотрудниками Института разработаны уникальные методики определения предельных и прочностных свойств структурных составляющих композитов на микро- и мезоуровне. Комплексные исследования позволили разработать ряд оригинальных технологий изготовления композитов. Среди них изготовление гибридных слоистых бороалюминиевых композитов (боралей) с функцией нейтронной защиты методом горячей прокатки. Получены металлополимерные композитов из сталей 09Г2С и 001/ЮТ, алюминиевого и титанового сплавов с прослойками морозотеплостойкой резины, органопластиков на основе эпоксидной смолы, армированных базальтовым волокном полиэфирэфиркетоном и слоями ткани из арамидного волокна. Созданы высокопрочные дисперсно-упрочненные алюмоматричные композиты системы В95-TiC с использованием жидкофазной технологии. Методами горячего прессования и искрового плазменного спекания проведен синтез алюмоматричных композитов из смесей порошков Al, B_4C, SiC, Al_2O_3 и установлено влияние дисперсности и соотношения порошковых частиц различного состава на процессы формирования структуры алюминиевый матрицы и физико-механические свойства алюмоматричных композитов. Получены результаты трибологических испытаний дисперсно-упрочненных алюмоматричных композитов с различным составов и размерами упрочняющих порошковых частиц, выявлены особенности

строения поверхности абразивного износа. Разработана технологии изготовления износостойких СВС-композитов с железо-никелевой матрицей и упрочняющими фазами TiC, TiB_2, Fe_2B, Ni_3Ti, NiTi и их пластической деформации методом горячей прокатки в оболочке.

Традиционно в Институте проводятся исследования для разработки и внедрения новых технологий по обработке давлением сталей и сплавов в рамках стратегического взаимодействия с уральскими металлургическими предприятиях. Так для Каменск-Уральского металлургического завода разработаны новые технологии рециклинга передних концов прессуемых заготовок круглого сечения и штамповки изделий сложной формы из труднодеформируемых алюминиевых сплавов исходя из критериев минимизации расходного коэффициента металла и исчерпания ресурса пластичности. На металлургическом заводе в Верхнем Уфалее внедрены оригинальные технологические режимы ковки слитков из высоколегированной стали, исключившие образование трещин при деформации. Создан цифровой двойник трубопрокатного агрегата, используемый для оптимизации технологий производства труб на Северском металлургическом заводе. Разработаны экономно-легированные (3-5% Ni) азотсодержащие порошковые проволоки для сварки высокопрочных и дуплексных сталей. Их использование позволяет сваривать крупногабаритные конструкции сложной формы без применения подогрева и последующей термообработки. Совместно с ИФМ УрО РАН разработаны оригинальные технологии поверхностного упрочнения сталей методом фрикционной наноструктурирующей обработки и алюминиевых сплавов с использованием лазерного легирования.

Перспективной и востребованной тематикой остается разработка и совершенствование методов неразрушающего контроля и диагностики свойств и состояния материалов элементов конструкций, которая развивается в рамках научной школы академика Э.С. Горкунова. Целью, созданной в рамках конкурса Минобрнауки, молодежной Технологической лаборатории, является обоснование новой концепции оценки ресурса элементов конструкций, находящихся под действием интенсивных механических нагрузок в широком интервале климатических температур, за счет использования комбинации магнитных методов неразрушающего контроля и метода кинетического индентирования и разработка мобильного измерительного комплекса для практической реализации этой концепции.

Результаты фундаментальных и прикладных исследований, выполненные в разные годы обобщены в изданной к 40-летию Института книге «40 лет ИМАШ УрО РАН» (Екатеринбург, 2026. – 304 с.).

ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОКРЫТИЯ Ni–6Al–5Mo + WC, СФОРМИРОВАННОГО ЛАЗЕРНОЙ НАПЛАВКОЙ

Н.Н. Соболева[1, 2, 3], Н.А. Давыдова[2], С.Е. Крылова[4], П.А. Скорынина[2], В.А. Сирош[1], А.В. Макаров[1, 2, 3]

[1]*Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, Екатеринбург*
[2]*Институт машиноведения имени Э.С. Горкунова Уральского отделения Российской академии наук, Екатеринбург*
[3]*Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург*
[4]*ООО «Технология», Оренбург*
natashasoboleva@list.ru

Лазерная наплавка является современным и технологичным методом восстановления изношенных поверхностей деталей машин. Для формирования лазерной наплавкой покрытий на поверхности сталей и цветных сплавов может быть использован порошок из никелевого сплава, легированного алюминием и молибденом. Его использование обеспечивает получение коррозионностойких и теплостойких покрытий, характеризующихся высокой температурой плавления [1].

Такие материалы, однако, не обладают высокой абразивной износостойкостью. Одним из методов повышения стойкости никелевых покрытий к абразивному износу может быть формирование на их основе композиционных покрытий с твердыми упрочняющими частицами, в частности, карбидами [2]. Ввиду изложенного, в данной работе было сформировано покрытие на основе порошка RotoTec 29029S (Ni–6Al–5Mo) с 30% карбида вольфрама. Исследованы его микроструктура, микротвердость и износостойкость при абразивном воздействии.

Показано, что использованный режим лазерной наплавки позволил получить композиционное покрытие, в котором никелевый сплав выступает в качестве пластичной матрицы, а карбиды вольфрама – в качестве упрочняющих частиц. Это способствовало значительному повышению средней микротвердости Ni–6Al–5Mo + WC покрытия по сравнению с покрытием без WC. Композиционное покрытие характеризуется малой интенсивностью изнашивания в условиях испытаний по абразивам различной твердости – корунду и карбиду кремния. Эффективность повышения износостойкости при добавлении частиц WC при формировании Ni–6Al–5Mo покрытия существенно выше при испытаниях по наименее твердому абразиву корунду. Изучены поверхности изнашивания, обсуждены механизмы изнашивания покрытий Ni–6Al–5Mo и Ni–6Al–5Mo + WC покрытий, сформированных лазерной наплавкой.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России для ИФМ УрО РАН и ИМАШ УрО РАН. Экспериментальные исследования проведены с использованием оборудования ЦКП «Пластометрия» ИМАШ УрО РАН.

Литература

1. J. Bang, E. Lee. Evaluation of the Mechanical and Corrosion Behavior of Twin Wire Arc Sprayed Ni-Al Coatings with Different Al and Mo Content. Coatings, 2023, 13, 1069.
2. А.В. Макаров, Н.Н. Соболева, И.Ю. Малыгина, А.Л. Осинцева. Формирование композиционного покрытия NiCrBSi–TiC с повышенной абразивной износостойкостью методом газопорошковой лазерной наплавки. Упрочняющие технологии и покрытия, 2013, № 11 (107), 38-44.

ВЛИЯНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА МАКРО- И МИКРОСТРУКТУРУ ИЗДЕЛИЙ ИЗ ВЫСОКОЛЕГИРОВАННОЙ ХРОМИСТОЙ СТАЛИ 20Х13, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ЛАЗЕРНО-ПРОВОЛОЧНОЙ НАПЛАВКИ

Д.В. Сташков, Т.В. Ольшанская

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь
stashkov.1999@mail.ru

Высоколегированная хромистая сталь мартенситного класса 20Х13 применяют для изготовления клапанов гидравлических прессов, лопаток паровых турбин, поршневых колец и других деталей, подвергающихся ударным нагрузкам и работающих при температуре до 450-500 ℃, а также изделий, подвергающихся воздействию слабоагрессивных сред. Проволоку из стали 20Х13 применяют, в частности, для восстановления роликов машин непрерывного литья заготовок и восстановления и упрочнения изношенных частей запорной арматуры [1]. Данная сталь так же активно применяют для работы при температурах до +600 ОС в разных энергетических установках. Из данного материала делают диски, роторы, лопатки для турбин, а также кольцевые детали большой толщины.

В статье исследовано несколько вариантов термической обработки и их влияние на механические свойства изделий из стали 20Х13, полученных методом лазерно-проволочной наплавки.

Методика исследования заключается в выращивании стенки размером 76х15,5х125 мм (ДхШхВ) и вырезке из неё образцов. Далее один из образцов (№1) остаётся без термической обработки и два образца (№2 и №3) подвергаются двум различным видам термообработки [2]. Для всех трёх видов образцов проводят металлографический анализ.

Таблица 1. Образцы после наплавки и термообработки.

Маркировка	Вид термической обработки
№1	Без термической обработки
№2	Закалка Т = 1020°С, время выдержки 40 мин, охлаждение в воду; Отпуск Т = 720°С, время выдержки 3 часа, охлаждение с печью
№3	Закалка Т = 1050°С, время выдержки 1,5 часа, охлаждение в масло; Отпуск Т = 450°С, время выдержки 3 часа, охлаждение на воздухе



Рис.1. Макроструктура образца №1



Рис.2. Макроструктура образца №2

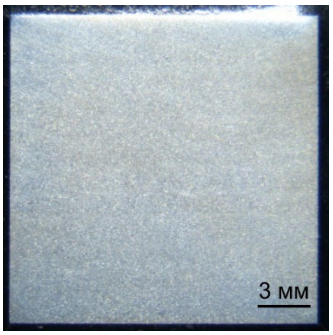
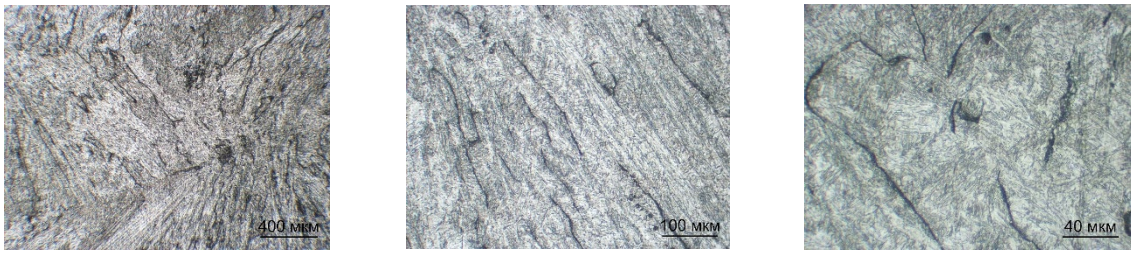


Рис.3. Макроструктура образца №3

После наплавки образца №1 в макроструктуре поперечного сечения наблюдается разориентированная структура мелких столбчатых зерен, сформировавшихся в пределах одного слоя (Рис.1). После проведения термообработки по образцам №2 и №3 формируется однородная мелкозернистая макроструктура.



а б в

Рис.4. Микроструктура образца №1: а - увеличение х50, б – увеличение х200, в – увеличение х500.

а б в

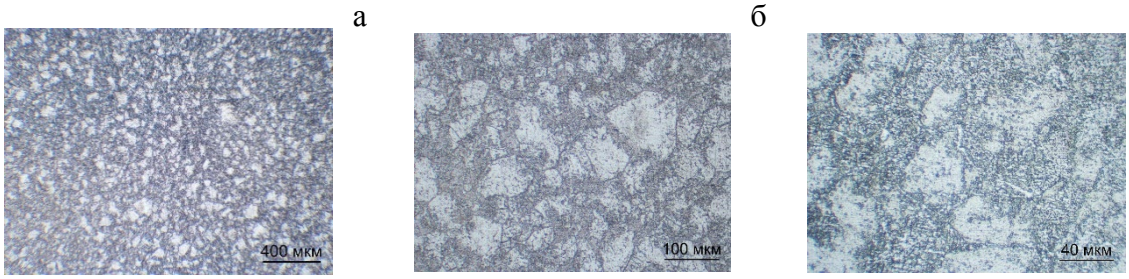


Рис.5. Микроструктура образца №2: а - увеличение х50, б – увеличение х200, в – увеличение х500.

а б в

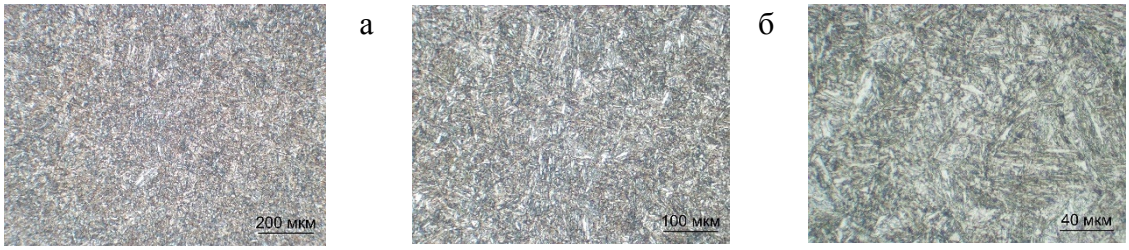


Рис.6. Микроструктура образца №3: а - увеличение х100, б – увеличение х200, в – увеличение х500.

На рисунке 4 представлена микроструктура образца №1, который не подвергался термической обработке. Границы между слоями можно выявить только при небольшом увеличении × 50. Формируется разориентированная микроструктура: первичные столбчатые дендриты образуются в пределах только одного слоя. По границам дендритов наблюдаются выделения δ-феррита (высокотемпературный феррит, образующийся при кристаллизации). Вторичная (перекристаллизованная) микроструктура похожа на высоко отпущенную закалочною структуру (бейнито-мартенситную).

После термической обработки в образце №2 сформировалась структура (Рис.5), состоящая из высокохромистого феррита и «перлита» (ферритокарбидная смесь, карбиды типа $Me_{23}C_6$). При этом ферритокарбидная смесь (ФКС) образовалась по границам феррита. Внутри зерен высокохромистого феррита также наблюдаются выделения редкие выделения карбидов, размером намного меньше, чем в ФКС.

При проведении термической обработки образца №3 сформировалась однородная микроструктура во всех сечениях наплавленной стенки. Микроструктура соответствует мартенситу отпуска. Твердость составила HRC 37-38,5.

Исходя из вышеизложенного можно сделать вывод, что применение термической обработки положительно влияет на механические свойства и структуру выращенных изделий, позволяя получить однородную мелкозернистую микроструктуру. В результате механических испытаний, у выращенных образцов показатели выше, чем у изделий, полученных традиционными методами.

Литература

1. Е.Н. Еремин, А.С. Лосев, С.А. Бородихин, А.Е. Маталасова, И.А. Пономарев, А.А. Маркин, М.Ю. Филиппов. Свойства и структура металла 20Х13, наплавленного в различных защитных газовых средах. Master’s Journal., 2017, 1(47) 17-21.
2. Б.Н. Арзамасов [и др.]. Материаловедение. М: Машиностроение, 1986. 384 с.

МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ЭЛЕКТРОПЛАСТИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА

В.В. Столяров

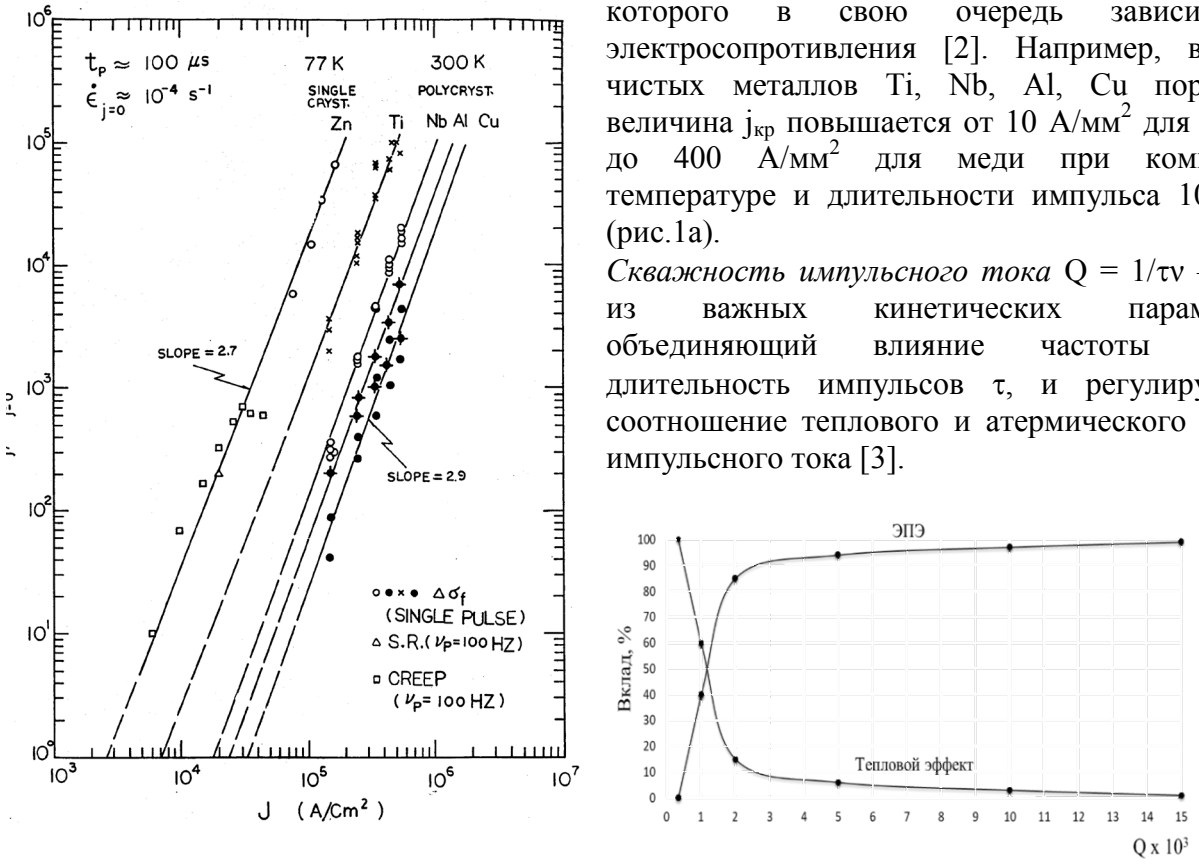
Институт машиноведения им. А.А. Благонравова РАН, Москва
vlstol@mail.ru

В статье представлен краткий обзор явлений, связанных с пластической деформацией растяжением в сопровождении импульсного тока различных металлических материалов. Рассмотрены внешние (вид и режимы тока) и внутренние (фазовый и химический состав, микроструктура, физические и механические свойства материала) факторы.

Накопленный опыт по применению электрического тока свидетельствует о наличии нескольких критических условий возникновения ЭПЭ, связанных либо с параметрами импульсного тока, либо с микроструктурой [1].

Плотность импульсного тока – один из важных энергетических параметров, который фактически определяет количество свободных электронов, взаимодействующих с веществом. Эффект проявляется при превышении порогового значения $j>j_{кр.}$, величина которого в свою очередь зависит от электросопротивления [2]. Например, в ряду чистых металлов Ti, Nb, Al, Cu пороговая величина $j_{кр}$ повышается от 10 А/мм^2 для титана до 400 А/мм^2 для меди при комнатной температуре и длительности импульса 100 мкс (рис.1а).

Скважность импульсного тока $Q = 1/\tau\nu$ – один из важных кинетических параметров, объединяющий влияние частоты ν и длительность импульсов τ, и регулирующий соотношение теплового и атермического вклада импульсного тока [3].



а б

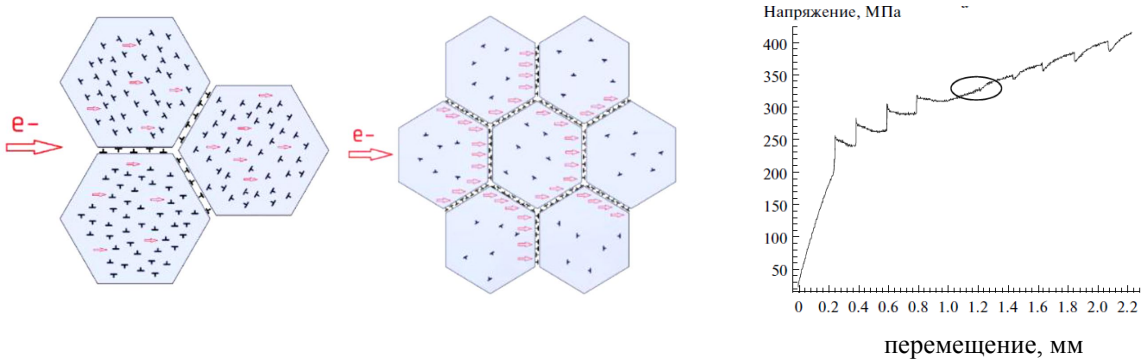
Рис.1. Влияние плотности тока (а) и скважности (б) на ЭПЭ в различных металлах

В работе [3] авторы исследовали влияние скважности в широком интервале значений и нашли, что в крупнозернистом титане повышение скважности приводит к повышению вклада истинного ЭПЭ и, соответственно, к снижению теплового эффекта тока. При снижении скважности до Q=10 истинный (атермический) ЭПЭ уменьшается и практически исчезает (рис.1б).

Размер зерен в исследуемом материале – структурный параметр, определяющий возможность наблюдения ЭПЭ. Оказалось, что в монокристаллическом состоянии высокочистый алюминий проявляет максимальный по величине ЭПЭ по сравнению с

крупнозернистым состоянием [5], в технически чистом титане он уменьшается более, чем в два раза при уменьшении размера зерен с десятков микрон до сотен нанометров [6].

В аморфном состоянии ЭПЭ отсутствует в сплавах TiNiCu и FeSiB, но появляется при их нанокристаллизации, вызванной нагревом током или в печи [7]. Такое структурно зависимое поведение ЭПЭ согласуется с предложенным ранее механизмом электронного «ветра», по которому свободные электроны взаимодействуют с дефектами кристаллической решетки (дислокациями) и передают импульс силы (рис.2).



а б

Рис.2. Механизм электронного ветра в КЗ и УМЗ структурах (а) и кривая напряжение-перемещение в крупнозернистом сплаве $Ti_{49.3}Ni_{50.7}$ при плотности тока j = 1500 А/мм^2 (б).

Поскольку свободный пробег дислокаций связан с размером зерен, то ясно, что измельчение структуры должно способствовать снижению в наноструктурных материалах и даже исчезновению ЭПЭ в аморфных состояниях.

Фазовые превращения в сплавах, происходящие при изменении температуры или напряжения, могут также влиять на интенсивность ЭПЭ. Например, в сплавах TiNi с памятью формы аустенитно-мартенситное превращение в процессе растяжения (скачки вверх) способно частично компенсировать и даже нивелировать ЭПЭ (скачки вниз), вызываемые одиночными импульсами тока (рис.3) [7].

Работа выполнена за счет средств Госзадания FFGU-2026–0003

Литература

1. V.V. Stolyarov. Critical parameters of the athermal electroplastic effect in metallic materials. Eng. Technol. System, 2024, 34(3) 461-473.
2. H. Conrad. Electroplasticity in metals and ceramics. Mater. Sci. Eng., 2000, A287, 276–287.
3. V.V. Stolyarov. Pulse current duty cycle and its role in the electroplastic effect of conductive materials. J. of Mater. Eng. Perform, 2026.
4. V. Stolyarov, O. Korolkov. The influence of pulse current duty cycle on the tensile deformation behavior of commercially pure titanium. AIMS Mater. Sci., 2026, 13(3) 577–592.
5. М.А. Пахомов, В.В. Столяров. Особенности электропластического эффекта в моно- и поликристаллическом алюминии. Металловедение и термическая обработка металлов, 2021, 5(791) 8–14.
6. О.Е. Корольков, М.А. Пахомов, А.В. Поляков и др. Влияние размера зерна и скважности на механическое поведение титана при растяжении с импульсным током. Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов, 2022, 14, 639–651.
7. В.В. Столяров. Электропластический эффект и фазовые превращения в аморфных и нанокристаллических сплавах под влиянием растяжения с током. Изв. РАН. Серия физическая, 2015, 79(9) 1314–1317.

ЭЛЕКТРОПЛАСТИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ И СКВАЖНОСТЬ ИМПУЛЬСНОГО ТОКА

В.В. Столяров

Институт машиноведения им. А.А. Благонравова, Москва
vlstol@mail.ru

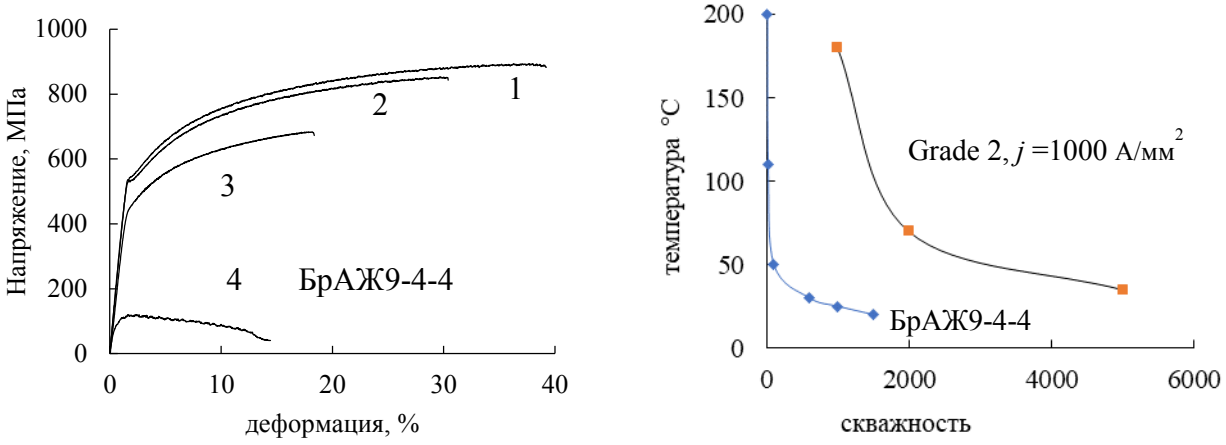
Рассмотрена роль плотности тока и скважности, являющимися критическими параметрами электропластического эффекта и определяющими деформационное поведение металлических материалов при растяжении в сопровождении импульсного тока. На примере нескольких материалов на основе меди, алюминия и титана демонстрируется влияние скважности и плотности тока на соотношение теплового и чисто электропластического вкладов импульсного тока.

Пластическая деформация и электрический ток, действующие раздельно, обычно оказывают противоположное влияние на деформационное поведение и напряжения течения в электропроводящих материалах [1]. В случае совместного действия пластической деформации и приложенного электрического тока результат не является заранее предсказуемым. Исследование синергетического эффекта деформации и электрического тока может быть использовано для обработки металлов давлением.

Цель статьи - демонстрация влияния скважности и плотности импульсного тока в широком интервале значений на скачкообразное деформационное поведение в различных материалах.

Объектами исследования являются материалы с отличающимся уровнем удельного электросопротивления (хорошо проводящие материалы – медь, бронза, алюминиевые сплавы; слабо проводящие материалы - сплавы на основе титана. Материалы были исследованы в отожженном крупнозернистом (КЗ) состоянии.

Влияние скважности при малых значениях $10 \le Q \le 100$ на деформационное поведение на примере бронзы БрАЖ9-4–4 (рис. 1а).



а б

Рис. 1. Влияние скважности тока на деформационное поведение (а, j =200 А/мм^2) и температуру образца (б): 1 – без тока; 2 – Q = 100; 3 – Q = 20; 4 – Q = 10 [2]

Растяжение без тока (кривая 1) характеризуется максимальной прочностью и относительным удлинением бронзы, а также отсутствием скачков напряжения. Введение импульсного тока снижает напряжения течения и относительное удлинение до разрушения и влияет на характер механического поведения. Деформационное упрочнение при скважности

Q = 100 и 20 (кривые 2 и 3) сменяется деформационным разупрочнением при скважности Q = 10 (кривая 4). Кроме того, снижение скважности повышает температуру образцов, особенно сильно в слабо проводящем титане *Grade* 4, по сравнению с бронзой БрАЖ 9-4-4 (рис. 1б). Видно, что для достижения комнатной температуры (атермического ЭПЭ) необходимо повышать скважность более 1000 и 5000, соответственно, для бронзы и титана.

Влияние скважности при более высоких значениях $1000 \le Q \le 20000$ показано на рис. 2 для медного сплава БрАЖ9-4-4 (получены при различных комбинациях скважности и плотности тока). Введение одиночных импульсов тока при постоянной длительности импульса вызывает появление скачков напряжения вниз разной амплитуды (от 10 до 120 МПа), зависящей от плотности и скважности тока. При высокой плотности тока 1600 А/мм^2 уменьшение скважности от 20000 до 15000 практически не влияет на амплитуду скачка (кривые 2 и 3), но снижает относительное удлинение и повышает температуру образца с 70 до 80 °С.

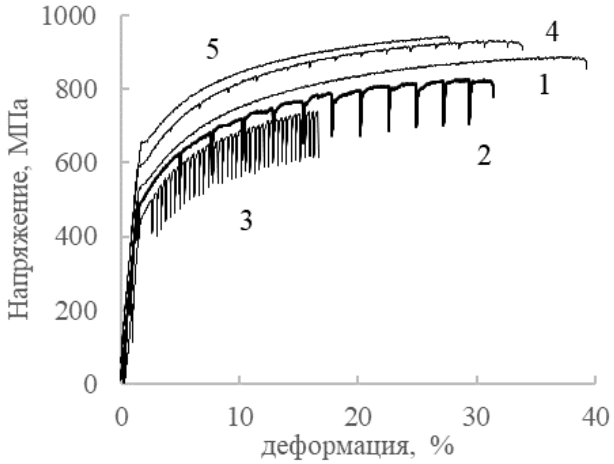
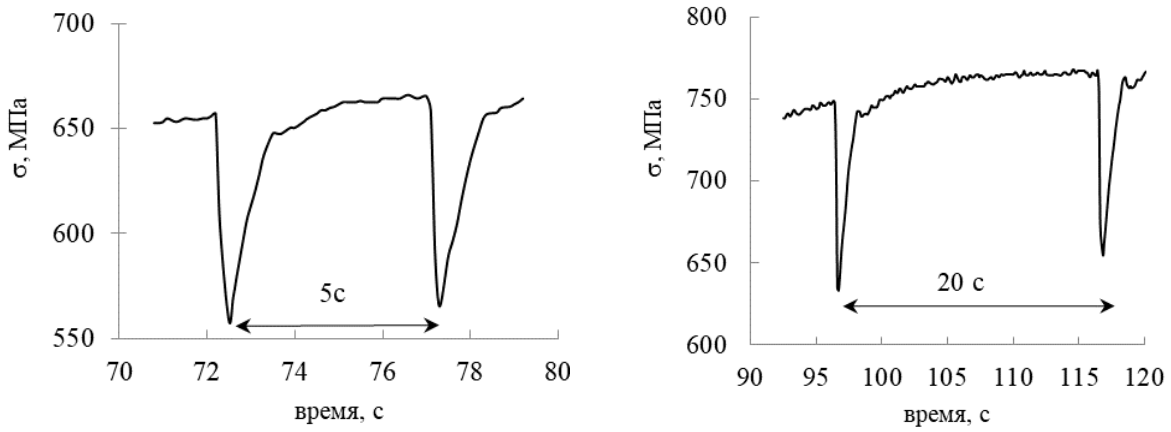


Рис. 2. Кривые напряжение-деформация для БрАЖ 9-4-4 при τ = 1000 мкс: 1 – без тока; 2 – j = 1600 А/мм^2, Q = 20000; 3 – j = 1600 А/мм^2, Q = 15000; 4 – Q = 20000, j = 450 А/мм^2; 5 – Q = 100, j =400 А/мм^2. Кривые 4 и 5 сдвинуты вверх на 50 МПа по оси Y, чтобы избежать наложения [2].

При более низкой плотности тока 400–450 А/мм^2 скачки напряжения уменьшаются по амплитуде и даже исчезают со снижением скважности от 20000 до 100 (кривые 4 и 5). В этом случае также происходит повышение температуры образца, но более значимое (на 40 °С). Отметим, что в данной статье наблюдающиеся скачки в упругой области не рассматриваются, поскольку их появление является следствием теплового расширения образца и не связано с ЭПЭ.

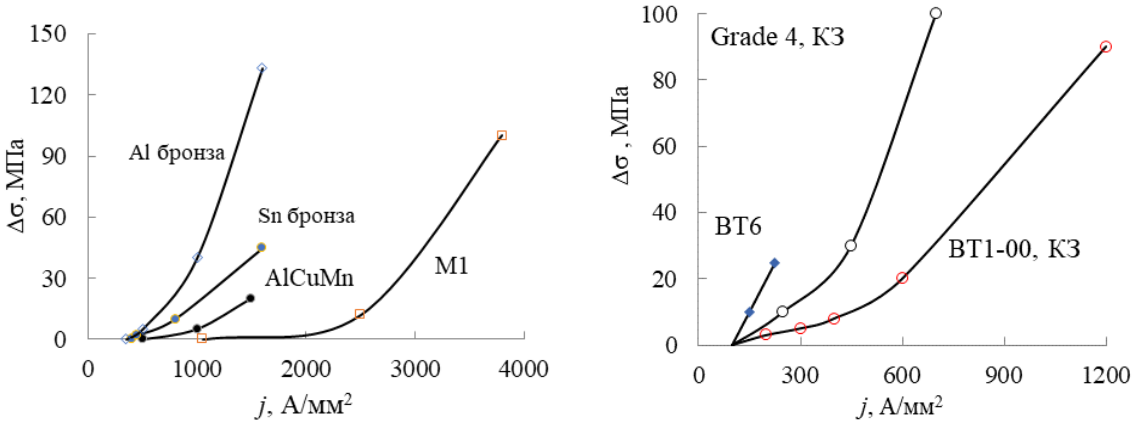
На рис. 3 иллюстрируется влияние скважности при одинаковой плотности тока и длительности импульса на взаимное расположение скачков напряжения, а также их форму и амплитуду в бронзе БрАЖ9-4-4. Четырехкратное повышение скважности с 5000 до 20000 привело к слабому увеличению амплитуды скачка напряжений с 110 до 120 МПа и действующих напряжений течения. Независимо от скважности форма скачка напряжений является ассиметричной. Снижение напряжения в скачке (левая часть) происходит почти на порядок быстрее, чем его восстановление (правая часть).



а б

Рис. 3. Влияние скважности на форму и амплитуды скачка напряжений при j = 1600 А/мм^2 и τ = 1000 мкс: a – Q = 5000; b – Q = 20000 [2]

Влияние плотности тока на амплитуду скачков напряжения показано на рис.4 для сплавов высокой (рис.4а) и низкой электропроводности (рис.4б). Все кривые носят экспоненциальный характер, отличающийся показателем степени. Видно, что для каждого материала существует своя критическая (пороговая) плотность тока $j_{кр}$, ниже которой ЭПЭ не проявляется, а выше этого значения амплитуда скачка повышается с увеличением плотности тока по экспоненте. Она наименьшая в слабо проводящих титановых сплавах *Grade* 4, ВТ1-00, ВТ6 и наибольшая в высоко проводящей меди (около 1000 А/мм^2). В сплавах на основе меди и алюминия критическая плотность тока имеет промежуточные значения.



а б

Рис. 4. Влияние плотности тока на амплитуду скачка напряжения в КЗ материалах: а – сплавы на основе *Al* и *Cu*; б – титановые сплавы. Длительность импульса τ = 1000 мкс, Q = 30000 [2].

Работа выполнена за счет средств Госзадания FFGU-2026–0003

Литература

1. V.V. Stolyarov, A.A. Misochenko. Pulsed current application to the deformation processing of materials. Mater., 2023, 16 Article no. 6270.
2. В.В. Столяров. Критические параметры атермического электропластического эффекта в металлических материалах. Eng. Technol. Systems., 2024, 4 (3) 461-473.

СЕНГЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ПЕРЕХОД В СОПОЛИМЕРАХ ВДФ: ТЕОРИЯ И МОДЕЛИРОВАНИЕ

В.И. Султанов, В.В. Атражев, Д.В. Дмитриев

Институт биохимической физики РАН, Москва
vadim-sultanov@deom.chph.ras.ru

Полимерные сегнетоэлектрики на основе сополимера винилидендифторида (ВДФ) и трифторэтилена (ТрФЭ) вызывают большой практический интерес благодаря сочетанию гибкости, технологичности и ярко выраженных электроактивных свойств — сегнетоэлектричества, пьезоэффекта и электрокалорического эффекта. Несмотря на длительную историю изучения, теоретическое описание фазовых переходов в этих материалах до сих пор опирается в основном на феноменологические модели Ландау-Девоншира, коэффициенты которых лишены прямого микроскопического смысла. В настоящей работе предложена физически обоснованная аналитическая модель, которая описывает поляризационный отклик при переходе из ферроэлектрической β-фазы в параэлектрическую конформационно-разупорядоченную (кóндис) фазу. Модель калибруется по данным молекулярно-динамического (МД) моделирования для монокристалла сополимера состава ВДФ:ТрФЭ = 55:45, а затем обобщается на случай реального аморфно-кристаллического полимера путём введения распределения температур перехода по кристаллитам.

Основные закономерности, выявленные в МД моделировании, состоят в следующем. Фазовый переход является переходом первого рода: при достижении температуры перехода скачком меняются дипольный момент, поперечный параметр решётки (площадь поперечного сечения, приходящаяся на одну полимерную цепь) и доля *гош*-конформаций. Внешнее электрическое поле сдвигает температуру перехода в область более высоких значений, увеличивая поляризацию в низкотемпературной фазе. Ключевым наблюдением, лёгшим в основу модели, оказалась универсальность зависимости доли *гош*-конформаций от поперечного параметра решётки a: эта зависимость практически нечувствительна к величине приложенного поля, что указывает на определяющую роль межцепных взаимодействий. Физически это объясняется тем, что образование гош-конформаций смещает цепь в поперечном направлении, увеличивая энергию отталкивания с соседними цепями.

Для описания поляризации используется одномерная модель Изинга, в которой цепь рассматривается как последовательность диполей, ориентированных параллельно или антипараллельно полю; *транс*-конформация соответствует параллельным соседним диполям, а *гош* — антипараллельным. Энергия системы записывается в виде

$$U = \sum_i U_{t,i} + \sum_i \Delta U(a)\frac{1 - p_i p_{i+1}}{2} - \sum_i E'\, p_i.$$

Здесь $\sum_i U_{t,i}$ — базовая энергия *транс*-конформаций с учётом малых тепловых отклонений от оптимального угла. Параметр ΔU — дополнительная энергия *гош*-конформации, зависящая от параметра решётки a. Переменная p_i представляет ориентацию i-го диполя, параллельную (+1) или антипараллельную (−1) внешнему полю. E' — эффективное нормированное внешнее поле, выраженное в единицах температуры (К). Второй член уравнения описывает взаимодействие между соседними диполями. Если $p_i = p_{i+1}$, то имеет место *транс*-конформация, и энергия взаимодействия равна нулю. В противном случае ($p_i = -p_{i+1}$) мы имеем *гош*-конформацию, что влечёт за собой энергетический штраф ΔU.

Эффективное нормированное поле E', действующее на диполь, является суммой приложенного нормированного поля $\mathcal{E}$ и внутреннего молекулярного поля $E_0 p$, аналогично полю Вейса в ферромагнетизме [1]. $p = \langle p_j \rangle$ — это средняя ориентация диполя мономерного

звена, что равно нормированной макроскопической поляризации, а E_0 — константа молекулярного поля, характеризующая диэлектрическую восприимчивость кристалла.

Точное решение модели Изинга методом трансфер-матрицы [2] даёт свободную энергию из расчёта на одно мономерное звено

$$F = -T \ln\left\{\sum_i \exp\left(-U_{t,i}/T\right) + \cosh[(E + E_0 p)/T] + \sqrt{e^{-2\Delta U/T} + \sinh^2[(E + E_0 p)/T]}\right\}.$$

Уравнение для нормированного среднего дипольного момента p можно получить из термодинамического соотношения $p = -\partial F/\partial E$:

$$p = \frac{\sinh[(E + E_0 p)/T]}{\sqrt{e^{-2\Delta U/T} + \sinh^2[(E + E_0 p)/T]}}$$

Очень важной величиной, наблюдаемой в МД расчётах, является доля *гош*-конформаций n_g. Выражение для неё можно получить из аналогичного термодинамического соотношения $n_g = \partial F/\partial(\Delta U)$. Ряд выкладок приводит к следующей зависимости n_g от p:

$$n_g = \frac{1 - p^2}{1 + p \coth[(E + E_0 p)/T]}$$

Это выражение очень хорошо воспроизводит данные МД расчётов при $E_0 = 280$ К.

Для межконформационной разности энергий ΔU можно вывести следующее выражение

$$\Delta U = -\frac{1}{2} T \ln\{X_0^2 - \sinh[(E + E_0 p)/T]\},$$

где $X_0 = \frac{1}{2}\frac{n_g}{1-n_g}\cosh[(E + E_0 p)/T] \cdot \left\{1 + \sqrt{1 + 4\tanh^2[(E + E_0 p)/T]\frac{1-n_g}{n_g}}\right\}$. Если подставить в это выражение данные МД расчётов для различных температур и значений внешнего поля, становится видно, что зависимость $\Delta U(a)$ 1) не зависит от внешнего поля, 2) хорошо аппроксимируется убывающей экспонентой $\Delta U = \Delta U_0 \exp[-(a - a_0)/\Delta a_0] + \Delta U_{00}$ при подгоночных параметрах $\Delta a_0 = 0.4$ Å, $\Delta U_0 = 6000$ К и $\Delta U_{00} = 250$ К (рис. 1).

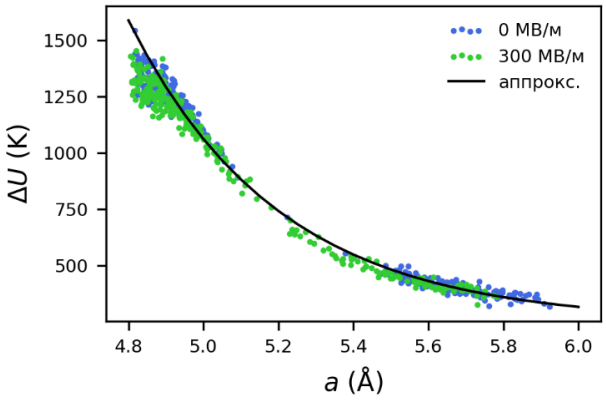


Рис. 1. Зависимость межконформационной разности энергий ΔU от поперечного параметра решётки при внешних полях 0 и 300 МВ/м, а также экспоненциальное приближение.

Для определения равновесного значения поперечного параметра решётки a при заданных значениях температуры и внешнего электрического поля применялась методика, разработанная нами ранее [3]. Для калибровки теории по МД данным была выбрана траектория изобарного нагревания системы во внешнем поле 100 МВ/м. Полученные из теории температурные зависимости параметра a, доли *гош*-конформаций n_g и среднего значения дипольного момента мономерного звена при значениях напряжённости внешнего поля 0 и 200 МВ/м хорошо совпали с данными, полученными из МД траекторий изобарного нагревания при соответствующих внешних полях.

Реальные образцы изучаемого сополимера всегда представляют собой не монокристаллы, а двухфазные аморфно-кристаллические системы, в которых из-за неодинаковых размеров кристаллитов их температуры перехода также неодинаковы. Поэтому для

сравнения теории с экспериментом использовалось гауссово распределение кристаллитов по температуре перехода, и теоретические значения наблюдаемых величин усреднялись по этому распределению. На рис. 2 с экспериментом сравнивается реманентная поляризация плёнки изучаемого сополимера, а на рис. 3 — петли гистерезиса, полученные для значения коэрцитивного электрического поля 50 МВ/м. Количественная неточность теоретических петель гистерезиса объясняется главным образом неучётом вклада т.н. ориентированной аморфной фракции на границе аморфной фазы с кристаллитами.

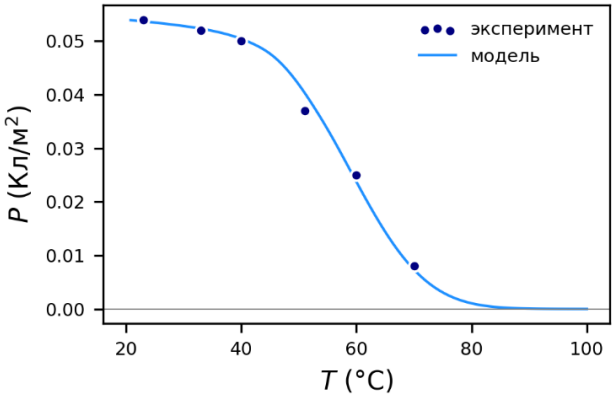


Рис. 2. Теоретическая и экспериментальная [4] реманентная поляризация плёнки сополимера

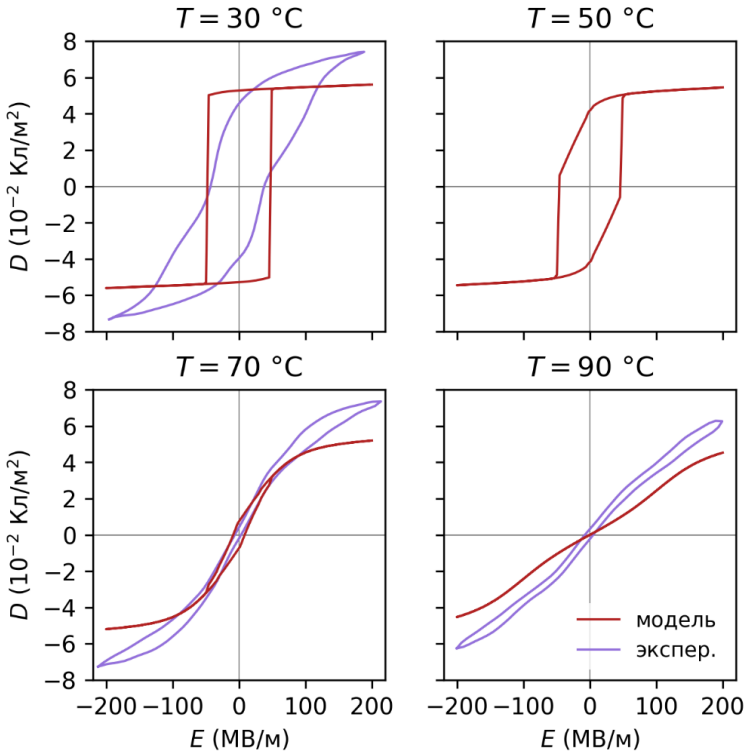


Рис. 3. Теоретические и экспериментальные [4] петли гистерезиса для разных температур.

Литература

1 B. D. Cullity and C. D. Graham. Introduction to Magnetic Materials, 2nd edition. Piscataway: IEEE Press, 2009. 534 c.

2 E.H. Lieb, D.C. Mattis. Mathematical Physics in One Dimension: Exactly Soluble Models of Interacting Particles. NY: Academic Press, 2013. 580 c.

3 V.V. Atrazhev, D.V. Dmitriev, V.I. Sultanov. Modeling of the polymer phase transition from crystalline to conformationally disordered phase. Phys. Rev. E, 2025, 112(2), 025422.

4 S.G. Lu, B. Rozic, Z. Kutnjiak, and Q.M. Zhang. Electrocaloric effect in ferroelectric P (VDF-TrFE) copolymers. Integr. Ferroelectrics, 2011, 125(1), 176–185.

ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ АМОРФНО-НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ КОМПОЗИТОВ В УСЛОВИЯХ ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ ВНЕШНИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ

Р.В. Сундеев [1, 2, 3], А.В. Шалимова[1], С.О. Рогачев[4]

[1]*Центральный научно-исследовательский институт черной металлургии имени И.П. Бардина, Москва*
[2]*МИРЭА – Российский технологический университет, Москва*
[3]*Институт электрофизики и электроэнергетики РАН, Санкт-Петербург*
[4]*МИСИС, Москва*
e-mail sundeev55@yandex.ru

Гибридные аморфно-нанокристаллические композиты представляют собой перспективный класс материалов, в которых удаётся объединить уникальный комплекс свойств, присущих аморфным и нанокристаллическим сплавам: высокую твёрдость, износостойкость, коррозионную стойкость и магнитомягкие характеристики – с одной стороны, и повышенную пластичность и термическую стабильность – с другой. Такой синергетический эффект делает эти материалы привлекательными для различных применений, однако их получение сопряжено с технологическими трудностями, связанными с сохранением аморфной фазы и формированием прочных межслойных границ. Одним из наиболее эффективных и технологичных подходов к созданию подобных композитов является консолидация свободно уложенных чередующихся аморфных и кристаллических слоёв методом кручения под высоким давлением (КВД). Этот метод позволяет реализовать большие пластические деформации при комнатной температуре, что обеспечивает плотное механическое соединение разнородных материалов без существенного нагрева, а следовательно, без риска нежелательной кристаллизации аморфной фазы. Вместе с тем, несмотря на накопленный экспериментальный материал, структурные закономерности формирования гибридных аморфно-кристаллических композитов, особенно в системах с взаимно нерастворимыми компонентами и резким различием механических свойств слоёв, к настоящему времени изучены крайне фрагментарно. Остаются не до конца выясненными механизмы измельчения и перераспределения твёрдой аморфной фазы в пластичной матрице, природа межслойных границ.

В работе композит собирали из двух медных лент (толщина 100 мкм) и аморфной ленты $Fe_{75}B_{17}Si_8$ (толщина 20 мкм). Консолидацию проводили при КВД (6 ГПа, 1 об/мин) с числом оборотов n = ¼, 1, 5, 10, 20, 25. Структуру изучали методами СЭМ с микрорентгеноспектральным анализом, рентгенофазовым анализом и наноиндентированием поперечных шлифов. Результаты. Показано, что в исходном состоянии слои имеют чёткую границу: Cu – кристаллическая фаза, $Fe_{75}B_{17}Si_8$ – рентгеноаморфна. После КВД формируется консолидированный материал, в котором медная матрица содержит фрагменты твёрдой аморфной фазы. Форма фрагментов – «сигарообразная» с перемычками, размеры уменьшаются с ростом n. Ключевая особенность – наличие зазора (~ 4 мкм при n = 1 до ~ 0,5 мкм при n = 25) между матрицей и включениями на всех стадиях деформации. Химический состав слоёв остаётся неизменным, взаимной диффузии не обнаружено. Сохранение зазора связано с отсутствием взаимной растворимости Fe и Cu при комнатной температуре и значительным различием механических свойств/атомной структуры слоёв. Торможение сдвиговой деформации в пластичной меди твёрдыми фрагментами аморфной фазы вызывает вихревую неустойчивость, характерную для КВД гетерогенных систем.

В результате КВД получен композит, представляющий собой упрочнённую мелкозернистую медную матрицу с равномерно распределёнными частицами аморфного сплава $Fe_{75}B_{17}Si_8$. Отличительной чертой является отсутствие сплошных межслойных границ даже при максимальных деформациях.

Авторы выражают благодарность РНФ за финансовую поддержку (грант 25-22-00132).

МИКРОСТРУКТУРА И ПРОЧНОСТЬ ТВЕРДОФАЗНОГО СОЕДИНЕНИЯ ИЗ ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ ЭК79 И ЭП741НП

А.А. Тагирова, В.А. Валитов, Э.В. Галиева

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
azaliya_tagirova72@mail.ru

Жаропрочные никелевые сплавы (ЖНС) широко используются для изготовления различных деталей газотурбинных двигателей(ГТД) [1]. В настоящее время одной из актуальных задач современного авиадвигателестроения является разработка и применение в перспективных ГТД биметаллических деталей, например, детали типа «диск-вал». Для получения неразъемных биметаллических соединений из разноименных ЖНС весьма эффективной является твердофазная сварка, позволяющая исключить образование литой структуры и дефектов, характерных для других видов сварок. Кроме того, последующая термическая обработка оказывает существенное влияние на формирование микроструктуры, перераспределение легирующих элементов в зоне твердофазного соединения и обеспечить высокий уровень кратковременных и жаропрочных свойств таких биметаллических соединений [2].

В данной работе исследована микроструктура и механические свойства твердофазных соединений между жаропрочными деформируемым ЭК79 и порошковым ЭП741НП сплавами на основе никеля. Твердофазную сварку проводили в условиях вакуума на цилиндрических образцах при температуре 1100°С по схеме одноосного сжатия. Исследования микроструктуры и распределения легирующих элементов в зоне твердофазного соединения выполнялись посредством растровой электронной микроскопии. Прочность оценивалась по результатам механических испытаний на растяжение при комнатной температуре.

В исходном состоянии оба сплава имели мелкозернистую структуру дуплексного типа, представляющую собой матричные зерна γ-фазы, некогерентные частицы γ'-фазы, а также дисперсные внутризеренные когерентные частицы γ'-фазы. Показано, что методом твердофазной сварки успешно получено качественное соединение из разноименных сплавов ЭК79//ЭП741НП. При этом, в зоне твердофазного соединения видна граница раздела сплавов, вдоль которой наблюдаются отдельные мелкие округлые поры. После твердофазной сварки оба сплава сохранили мелкозернистую структуру. По результатам энергодисперсионного анализа было установлено, что в процессе сварки в зоне соединения произошла взаимная диффузия легирующих элементов: Co и W из порошкового сплава ЭП741НП в деформируемый сплав ЭК79, а также встречная диффузия Cr и Mo. Ширина диффузионной зоны составила 26 мкм. Хрупких фаз не обнаружено. По результатам механических испытаний установлено, что прочность сварных образцов ЭК79//ЭП741НП составила 1470 МПа. Разрушение происходило по зоне твердофазного соединения.

Таким образом, показано что метод твердофазной сварки обеспечивает получение качественных твердофазных соединений ЭК79//ЭП741НП из разноименных ЖНС без образования трещин.

Литература

1. Ч.Т. Симс, Н.С. Столофф, У.К. Хагель. Жаропрочные материалы для аэрокосмических и промышленных энергоустановок. М.: Металлургия. В 2-х кн.–Пер. с англ, 1995. 384 с.
2. E.V. Galieva, A.A. Tagirova, R.R. Gabbasov, V.A. Valitov. Effect of heat treatment on the microstructure and properties of solid-state joints of dissimilar Ni-based superalloys. Lett. Mater. 2025, 13(4) 347-352.

ВЛИЯНИЕ ЛЕГИРОВАНИЯ V И C НА СТРУКТУРУ И ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА Fe-Ni ИНВАРНОГО СПЛАВА

Р.Р. Тимиряев, Р.М. Имаев

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
rasimtimiryaev@gmail.com

Бинарный инварный сплав Fe-36 вес.% Ni (далее Fe-36Ni) обычно используется в качестве элементов в приборах, которым необходимы стабильные размеры, в прецизионных инструментах, в микроэлектронике. Низкие механические свойства бинарного сплава ($\sigma_в < 500$ МПа) ограничивают возможности его использования в высоконагруженных и крупногабаритных конструкциях. Для расширения возможностей применения инварного сплава необходимо существенно повысить его прочностные свойства. В этом случае представляет интерес применение инварного сплава, например, для изготовления металлических конструкций мембранного танка для перевозки СПГ [1]. Благодаря уникальному свойству инвара минимально расширяться или сжиматься при изменении температуры не происходит растрескивания герметичного мембранного слоя в процессе заливки СПГ в цистерну, температура которого составляет T = -163°C. Нагревание газа в процессе транспортировки не приводит к изменению геометрических размеров стенки танка.

В работе [2] исследовалась возможность упрочнения сплава Fe-36Ni за счет измельчения микроструктуры до субмикронного уровня. Сплав был подвергнут равноканальному угловому прессованию, что позволило существенно измельчить его микроструктуру. Средний размер зерен уменьшился со 100 мкм до 180 нм. Это привело к повышению предела прочности $\sigma_в$ с 490 МПа до 912 МПа. При этом пластичность материала возросла (с δ=40% до δ=52%). Ещё более высокий предел прочности был достигнут в работе [3] – 1420 МПа, в которой методом кручения под давлением был достигнут размер зерен около 100 нм. Таким образом, уменьшение размера зерен до субмикронного уровня дает сильный эффект по зернограничному упрочнению, но, к сожалению, не реализуемо в промышленных масштабах. С помощью легирования можно заметно повысить прочность инварного сплава, но, при этом, непросто сохранить низкие значения ТКЛР. Для сохранения инварных свойств легирование должно быть исключительно продуманным и прецизионным. В этом случае, в работах [4-8] для повышения прочности использовали инварные сплавы с содержанием никеля 32 – 34 вес.%; углерода 0,7 вес. %; молибдена 2,3 – 3,4 вес.% и ванадия 1 – 1,5 вес.%. Максимальный предел прочности в этих работах был достигнут на сплаве Fe-32Ni-1.5V-0,76C: $\sigma_в$ = 1200 МПа, ТКЛР < 2×10^{-6} K^{-1}, хотя пластичность оказалась относительно невысокой ($\delta \approx 5$ %) в сравнении с бинарным сплавом.

В данной работе представлены результаты исследования особенностей микроструктуры и физико-механических свойств легированного Fe-Ni инварного сплава после деформационно-термической обработки с последующим старением при 500°C. В качестве объекта для исследования являлся инварных сплав Fe-32Ni-2.7(V,C), выплавленный в вакуумной индукционной печи в атмосфере аргона. Для повышения однородности химического состава, слиток подвергали гомогенизирующему отжигу при T = 1250°C в течении 2 часов. Одноосную изотермическую деформацию осуществляли при T = 900°C на 100-тонном гидравлическом прессе EU-100, со степенью деформации ε = 68%. Полученный образец нагревали до температуры закалки T = 1250°C в печи на воздухе и закаливали в воду. Для измельчения карбидных частиц и внедрение в образец большей плотности кристаллических дефектов, была использована холодная прокатка при комнатной температуре до относительного обжатия заготовки около 85%. После прокатки пластинки подвергались старению при температуре 500°C в течении τ = 60 минут. Температуру

старения, обеспечивающую наиболее высокую твердость, определяли на основе исследования зависимости твердости от температуры старения в течении $\tau = 60$ минут.

Микроструктурные исследования выполняли на растровом электронном микроскопе Mira-3 LMH (Tescan) в режиме обратно-рассеянных электронов (BSE). Оценку химического состава матрицы и карбидов проводили с помощью энергодисперсионного анализа. Микроструктура сплава Fe-32Ni-2,7(V,C) в литом состоянии представляет собой дендритное строение с дисперсным выделением карбидов. Размер зерен составляет несколько сотен микрон, а размер карбидов – 2 мкм. Некоторые карбиды располагаются ориентировочно вдоль границ зерен и имеют вытянутую форму, длина которых может достигать 5 мкм. После гомогенизирующего отжига и последующего охлаждения в печи размер зерен не изменяется, карбиды не укрупняются, наоборот, благодаря старению при охлаждении, возникают более дисперсные карбиды с размерами менее 1 мкм. Горячая деформация ковкой приводит к существенному измельчению микроструктуры сплава – формируется довольно однородная мелкозернистая структура с типичным размером зерен $d = 5$ мкм. После отжига при $T = 1250°C$ и закалки в воду размер зерен несколько увеличивается (до $d = 25$ мкм), происходит образование множества двойников отжига. При этом карбиды сохраняют свой размер, преимущественно 2 мкм. Микроструктура образцов после холодной прокатки состоит из макроскопических полос, преимущественно ориентированных под углом 45° к направлению прокатки. Размер зерен в данном состоянии составлял 2 мкм. В ходе холодной прокатки происходит динамическое старение, приводящее к заметному увеличению объемной доли карбидов, размеры которых находятся в диапазоне от нанометрических до 2 мкм. В результате старения при 500°C в течение 1 часа происходит выделение мелких частиц вторичной фазы размером менее 200 нм. На рис. 1 показана карта распределения химических элементов, из которой видно, что карбиды содержат элементы ванадия.

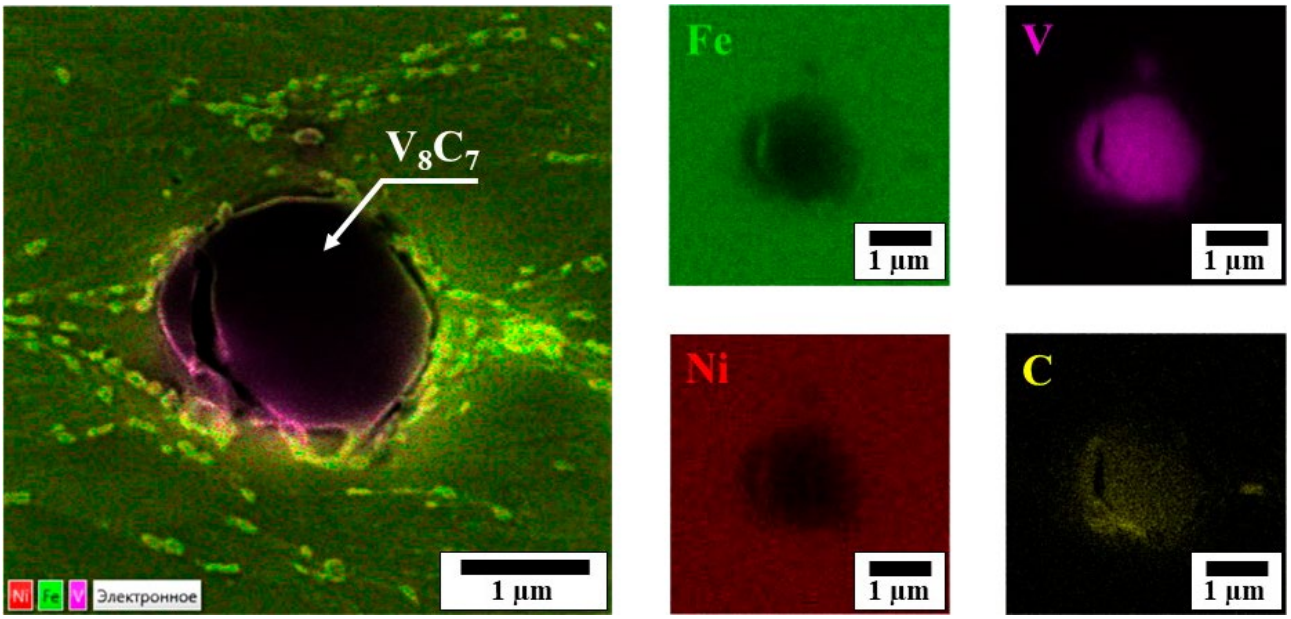


Рис. 1. Микроструктура сплава после старения при 500°C в течение 1 часа и карта распределения химических элементов в карбидах

Рентгеноструктурный анализ проводили на поперечном срезе образцов с помощью рентгеновской дифрактометрии на Cu-K_α излучении с фокусировкой Брэгг-Брентано, шагом сканирования 0,02° и временем экспозиции 1,5 секунды. Исследования показали, что наряду с основной фазой FeNiV присутствуют частицы, соответствующие фазе V_8C_7, что практически коррелирует с результатами EDS анализа (Рис. 1).

Механические испытания на растяжение были проведены на образцах, вырезанных из прокатных пластинок и подвергнутых последующему старению при температуре 500°C в

течение 1 часа, с размерами рабочей части 15×3×1,5 мм^3, которые после вырезки подвергали шлифовке на абразивной бумаге. Испытания выполняли при комнатной температуре и при температуре -196°С (в среде жидкого азота) с использованием испытательной машины фирмы Instron. В результате исследований было установлено, что максимальная прочность достигается после холодной прокатки – $\sigma_в = 1477$ МПа. При этом материал сохраняет приемлемое относительное удлинение до разрыва – $\delta = 4{,}0$ %. Наилучший баланс прочности и пластичности дает старение при $T = 500$°С – $\sigma_в = 1397$ МПа, $\delta = 5{,}6$ %. Растяжение образцов после старения в среде жидкого азота пластичность существенно возрастает до 20,9 %. При этом заметно повышается и предел прочности $\sigma_в = 1632$ МПа. Этот результат соответствует известным представлениям о том, что металлы с гранецентрированной кубической решеткой (медь, алюминий, никель, аустенитные хромоникелевые стали типа 12Х18Н10Т) при криогенных температурах обычно сохраняют высокую пластичность, ударную вязкость и даже могут увеличивать относительное удлинение [9].

Проведенные исследования показывают, что новый инварный сплав Fe-32Ni-2,7(V,C), легированный углеродом и ванадием, после деформационно-термической обработки демонстрирует рекордный предел прочности ($\sigma_в = 1397$ МПа), сохраняя, при этом, приемлемую пластичность ($\delta = 5{,}6$ %). Существенно более высокие свойства нового инварного сплава в сравнении с бинарным сплавом можно объяснить тем, что удалось реализовать дисперсное и деформационное упрочнение. Полученные в ходе исследования фазы V_8C_7 преимущественно располагаются вдоль границ зерен, что способствует торможению движений дислокаций в твердом теле, которое играет ключевую роль в механизме упрочнения материалов. В процессе деформационно-термической обработки размеры карбидов не изменялись, сохраняя свой размер, не превышавший 2 мкм

Литература

1. https://stg-gtt.com.
2. A Vinogradov, S Hashimoto, V.I. Kopylov. Enhanced strength and fatigue life of ultra-fine grain Fe-36Ni invar alloy. Mater Sci Eng. A, 2003, 355(1-2) 277-85.
3. N.R. Yusupova, K.A. Krylova, R.R. Mulyukov. Effect of microstructure on the strength of nanostructured 36N alloy. Lett. Mater., 2023, 13(3) 255-259.
4. М.В. Чукин, Э.М. Голубчик, А.С. Кузнецова. Разработка композиций многофункциональных сплавов инварного класса с расширенными эксплуатационными характеристиками. Вестник МГТУ им. Г.И. Носова, 2013. №3 62-65.
5. М.П. Барышников, Э.М. Голубчик, Н.В. Копцева. Исследование свойств высокопрочных инварных сплавов нового поколения. Обработка сплошных и слоистых материалов, 2015. №2 13-18.
6. М.В. Чукин, Э.В. Голубчик, Г.С. Гун. Исследование физико-механических свойств и структуры высокопрочных многофункциональных сплавов инварного класса нового поколения. Вестник МГТУ им. Г.И. Носова, 2014. №1 43-46.
7. М.В. Чукин, Э.М. Голубчик, А.С. Кузнецова, Е.М. Медведева. Разработка инновационной технологии производства высокопрочных инварных сплавов нового поколения. Обработка сплошных и слоистых материалов, 2013. №1 65-69.
8. Н.В. Копцева, Д.М. Чукин, О.А. Никитенко. Особенности формирования структуры при закалке высокопрочных инварных сплавов с низким температурным коэффициентом линейного расширения. Обработка сплошных и слоистых материалов, 2014. №1 27-32.
9. О.В. Клявина. Физика пластичности кристаллов при гелиевых температурах. М.: Наука, 1987. 255 с.

ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ ШТАМПОВКИ ПОРШНЕЙ ДВИГАТЕЛЕЙ ВНУТРЕННЕГО СГОРАНИЯ

В.Г. Трифонов

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
vadimt@imsp.ru

Поршень является наиболее нагруженной деталью двигателя внутреннего сгорания. От его работоспособности зависит ресурс и мощность двигателя. Конструкция поршня и технология его изготовления во многом определяется требованиями, предъявляемыми к двигателю.

Литье является наиболее распространенным, высокопроизводительным и эффективным способом изготовления поршней двигателей внутреннего сгорания. Однако уровень механических свойств литых поршней относительно невысок. Одним из способов, обеспечивающих высокие механические свойства поршней является изотермическая штамповка [1]. Однако в большинстве случаев изотермическая штамповка проводилась без учета температурно-скоростных и структурных факторов.

В настоящей работе дан анализ технологий, основанных на изотермической штамповке, и особенности их реализаций.

Основные материалы, применяемые для изготовления поршней, - это сложнолегированные силумины эвтектического (сплавы АЛ25, АЛ30, АК12М2МгН) и заэвтектического (сплавыАЛ26, АК21) состава. Структура силуминов в исходном литом состоянии состоит из дендритов твердого раствора легирующих элементов в алюминии, эвтектики содержащей кремний с твердым раствором, кристаллов первичного кремния и частиц интерметаллидов. Горячая деформация силуминов сопровождается дроблением частиц кремния и интерметаллидов, завариванием литейных пор, образованием новых дефектов в виде микропор и микротрещин. В общем случае горячая деформация приводила к повышению прочностных и пластических характеристик. Величина вклада деформации в изменение механических свойств зависит от исходной структуры сплавов, температурно-скоростных условий деформирования. Определены оптимальные условия деформирования, обеспечивающие максимальный уровень механических свойств [2].

Большую роль в работоспособности поршня играет сопротивление износу канавки под верхнее компрессионное кольцо. Износ канавки связан, в основном, со снижением прочностных свойств поршневых сплавов в результате длительного воздействия высоких температур. Повысить прочность материала в зоне канавки позволяет применение плазменной наплавки. Данный способ, заключающийся в переплавлении плазменной дугой металла в зоне канавки и введение в расплав легирующих элементов, исследован на литых поршнях [3]. Технология переплава и свойства полученной наплавки на поршне, изготовленного горячем деформированием, и литьем мало чем отличаются. Однако, различия появляются, если наплавка производится не на поршне, а на заготовке под последующую штамповку.

При формообразовании поршня в процессе горячей штамповки происходит деформирование наплавки. Деформированный материал наплавки по сравнению с литым имеет выше твердость и временное сопротивление. Более высокие значения твердости деформированной наплавки сохраняются и после последующего нагрева до 250^{o}C. Повышенный уровень свойств связан с более дисперсной структурой из-за частичного дробления интерметаллидов при горячей деформации и отсутствием концентраторов напряжений в виде усадочных раковин.

Таким образом, показана возможность изготовления поршней двигателей внутреннего сгорания штамповкой в изотермических условиях из заготовок с наплавкой, полученной путем переплава металла плазменной дугой и легирования никелем. Такая обработка

позволила дополнительно упрочнить канавку поршня, по сравнению с переплавом металла, произведенным на литой заготовке без деформирования.

Другим способом устранения износа канавки является установка в районе канавки кольцедержателя или накладки.

Кольцедержатель, предотвращающий разбитие канавки под компрессионные кольца, традиционно изготавливается из стали или чугуна (нирезиста). Разработан способ заштамповки кольцедержателя в поршень, обеспечив при этом беззазорное соединение. В этом случае целесообразна штамповка в условиях изотермии, которая обеспечивает формообразование поршня при меньших напряжения течения и предотвращает деформацию кольцедержателя.

Необходимость точного формообразования возникает при изготовлении поршней с чугунной накладкой, когда болтовое соединение накладки с корпусом поршня было заменено на замковое соединение. Была разработана конструкция накладки с выступами по внутренней поверхности, образующими после формообразования с заготовкой поршня из алюминиевого сплава замковое соединение. Штамповка в режиме изотермии обеспечило полное заполнение силумина во внутренние полости накладки, низкие напряжения течения предотвратили деформацию накладки. Соответствие температуры штамповки температуре нагрева под закалку позволило провести закалочное охлаждение поршня со штампа сразу после завершения формообразования. Исключение дополнительного нагрева под закалку поршня с накладкой, изготовленных из материалов с различными коэффициентами линейного расширения, позволило получить надежное соединение.

Из вышесказанного следует, что метод изотермической штамповки поршней может иметь большие перспективы. Регламентирование режимов деформирования в зависимости от структуры заготовки приводит к дополнительному повышению уровня механических свойств поршневых материалов. Деформирование в режиме изотермии позволяет штамповать поршни из хрупких труднодеформируемых сплавов, включая композиционные материалы. Возможность применения изотермической штамповки при изготовлении поршней различных размеров и конструкций, а также в сочетании с другими методами упрочнения такими, как плазменная наплавка, предполагают использовать ее на предприятиях, связанных с изготовлением тракторных, автомобильных, судовых и других двигателей внутреннего сгорания.

Литература

1. Патент РФ №2176943. Способ изготовления поршня двигателя внутреннего сгорания.
2. V.G. Trifonov. Structural evolution of AL25 alloy during hot deformation. Izvestiya. Non-Ferrous Metallurgy. 2026, 32(1) 47-53.
3. А.Н. Шалай, Г.Н. Волошин. Упрочнение поршней тракторных двигателей наплавкой. Сварочное производство. 1987, (9) 4-6.

ВЛИЯНИЕ ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ КОВКИ И ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА МИКРОСТРУКТУРУ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НОВОГО ИНТЕРМЕТАЛЛИДНОГО СПЛАВА Ti-44.5Al-7(Nb,Zr,Ta,Hf)-0.1B (ат.%)

Д.М. Трофимов, В.М. Имаев, Р.М. Имаев

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
denis@imsp.ru

В настоящее время γ-TiAl сплавы применяются в качестве материала лопаток турбины низкого давления (ТНД) газотурбинных двигателей (ГТД), производимых ведущими зарубежными компаниями. Из сплава Ti-(47-48)Al-2Nb-2Cr (ат.%) (48-2-2), получаемого методом литья с последующей механической обработкой, изготавливаются лопатки последних ступеней ТНД для эксплуатации при температурах до 650–700°C в серийных двигателях GEnx и LEAP (General Electric, США). Для двигателя PW1100GTF (Pratt & Whitney, США), начиная с 2016 года, применяются лопатки из TNM-сплава состава Ti-(43–43.5)Al-4Nb-1Mo-0.1B (ат.%), изготавливаемые по технологии литья, изотермической штамповки и последующей термической обработки и предназначенные для эксплуатации при температурах до 750°C. Между тем одной из важнейших практических задач остается повышение рабочей температуры γ-TiAl сплавов до 800°C и выше, что важно для повышения энергоэффективности перспективных газотурбинных двигателей.

С этой целью в ИПСМ РАН был разработан новый TNZ-сплав состава Ti-(43.5-44.5)Al-6(Nb,Zr,Hf)-(0.1-0.15)B (ат.%), который, как было показано, превосходит промышленные сплавы 48-2-2 и TNM-сплав, используемые западными производителями в качестве материала турбинных лопаток, по жаропрочности и жаростойкости без ухудшения пластичности. Как было недавно показано, добавление в сплав 1 ат.% Ta дополнительно повышает сопротивление окислению сплава без ухудшения комплекса механических свойств. Для оценки потенциала нового сплава, исследовали влияние деформационно-термической обработки на его микроструктуру и механические свойства.

В настоящей работе исследовали влияние двух схем деформационной обработки — однократной изотермической осадки на небольшую степень и всесторонней изотермической ковки при 950°C, с последующей термической обработкой, включавшей в себя двухстадийный отжиг при 1250 и 90°C, на микроструктуру и механические свойства литого сплава Ti-44.5Al-7(Nb,Zr,Ta,Hf)-0.1B (ат.%). Режимы термической обработки выбирались таким образом, чтобы получить однородную структуру дуплексного типа. Электронно-микроскопические исследования позволили установить, что ковка с последующей термической обработкой обеспечивает более однородную микроструктуру, чем осадка с последующей термической обработкой. Выполненные испытания на растяжение и ползучесть выявили превосходство по пластичности и прочности состояния сплава, полученного с использованием изотермической ковки. Так, комнатная пластичность и прочность сплава после ковки и термической обработки составила $\delta\approx$1.5-2% и $\sigma_B\approx$780-830 МПа против $\delta\approx$1-1.4% и $\sigma_B\approx$730-770 МПа после однократной осадки и термической обработки, при этом сопротивление ползучести и длительная прочность обоих состояний сплавов при 750°C/320 МПа и 800°C/200 МПа оказались близки. Разработанный сплав сравнили с промышленными γ-TiAl сплавами западных производителей по механическим свойствам и жаростойкости. Показано, что новый сплав состава Ti-44.5Al-7(Nb,Zr,Ta,Hf)-0.1B (ат.%) заметно превосходит по своим свойствам западные аналоги.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Госзадания ИПСМ РАН (№ 124022900106-9). Экспериментальные исследования были выполнены на базе Центра коллективного пользования научным оборудованием ИПСМ РАН.

МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЯЧЕИСТОГО КОМПОЗИТНОГО МАТЕРИАЛА ГРАФЕНОВЫЙ АЭРОГЕЛЬ/МЕДЬ

И.И. Тувалев, Р.Т. Мурзаев

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
illumnus102@gmail.com

Аэрогели на основе графена представляют собой уникальный класс трёхмерных пористых углеродных материалов, образованных взаимосвязанными графеновыми листами, формирующими сверхлёгкий ячеистый каркас. Их структура, как правило, характеризуется иерархической сетью графеновых стенок, организованных в виде сотоподобной архитектуры, что сочетает низкую плотность с высокой удельной поверхностью и структурной стабильностью. Благодаря собственной механической прочности графена и топологии ячеистого каркаса графеновые аэрогели проявляют замечательные свойства, такие как высокая сжимаемость, упругое восстановление и устойчивость к механической деформации [1].

Несмотря на эти преимущества, исходные графеновые аэрогели часто обладают ограниченной функциональностью в приложениях, требующих повышенных тепловых или электрических характеристик [2]. Одной из перспективных стратегий настройки их свойств является введение металлических наполнителей в пористую графеновую структуру. Особый интерес представляют металлы с гранецентрированной кубической (ГЦК) решёткой, в частности медь, благодаря хорошо изученным свойствам и широкому технологическому применению. Взаимодействие между графеновым каркасом и металлическим наполнителем может существенно влиять общее поведение композита, что приводит к созданию новых многофункциональных материалов с регулируемыми механическими откликами.

Графеновый сотоподобный аэрогель представляет собой трёхмерную архитектуру с открытыми ячейками, сконструированную из графеновых нанопластин, собранных в периодическую ячеистую сеть. Структура состоит из сотоподобных элементов, стенки которых сходятся под характерными углами 120°, образуя механически стабильный каркас. В тройных узлах соединения стенок графеновые нанопластины ковалентно связаны посредством sp^3-гибридизации, что обеспечивает структурную целостность и непрерывность трёхмерной углеродной сети.

В качестве симулятора метода молекулярной динамики был выбран программный пакет LAMMPS. Для моделирования использован потенциал из открытой библиотеки NIST, разработанный Zhou с соавторами [3], который единым образом описывает взаимодействия Cu–Cu, C–C и C–Cu.

Перед построением композитных структур была создана и полностью релаксирована вспомогательная модель, состоящая из одного графенового листа, размещённого на медной подложке. После достижения конфигурации с минимальной энергией было определено равновесное расстояние между графеновым слоем и поверхностью металла. Это расстояние впоследствии использовалось в качестве структурного параметра при построении композитных моделей, что обеспечивало физически обоснованный зазор между стенками графеновой сотоподобной структуры и металлическим наполнителем.

Схематическое изображение начальных атомных структур графенового аэрогеля, заполненного металлом, представлено на рис. 1.

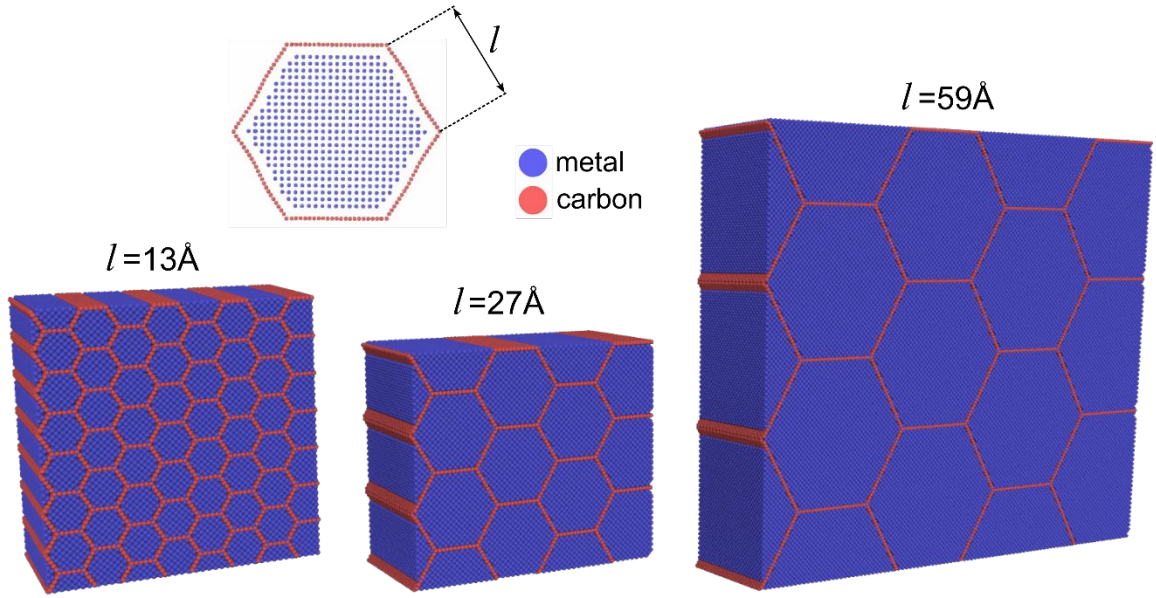


Рис. 1. Начальная структура композитного материала с длиной стенки (l) 12 Å, 24 Å и 59 Å. Голубым цветом показаны атомы металла (наполнитель), красным – атомы углерода (графен)

На рисунке 1 на верхней панели показан вид поперечного сечения сотовой элементарной ячейки, характеризующейся длиной стороны l. Для каждого материала рассматривались три значения длины стороны сотовой ячейки: l = 13, 27 и 59 Å. Общее количество атомов в каждой структуре, а также атомная доля каждого компонента относительно общего числа атомов приведены в табл. 1. Как видно из таблицы, доля атомов углерода уменьшается с увеличением размера сотовой ячейки. Наибольшая концентрация углерода (42.6%) наблюдается для ячейки с наименьшей стороной (l = 13 Å), тогда как наименьшее содержание углерода (9.1%) зафиксировано при l = 59 Å. При уменьшении длины стороны сотовой ячейки относительная объёмная доля границы раздела графен–металл возрастает. Следовательно, остаётся меньше пространства для металлического наполнителя, что приводит к снижению содержания металла в аэрогеле.

Таблица 1. Общее количество атомов (N) и процент количества атомов углерода (N_C) и металлов (N_{Cu}) в расчетной ячейке для композитов с тремя различными длинами сторон сотовой ячейки l (Å).

Длина стороны ячейки, l (Å)	N	$N_{C\,(\%)}$	$N_{Cu\,(\%)}$
13	45752	42.6	57.4
27	47748	19.6	80.4
59	226980	9.1	90.9

Для данных материалов была приложена деформация с фиксированной скоростью. В процессе деформации записывалось напряжение структуры, которое отображено в виде графика на рисунке 2.

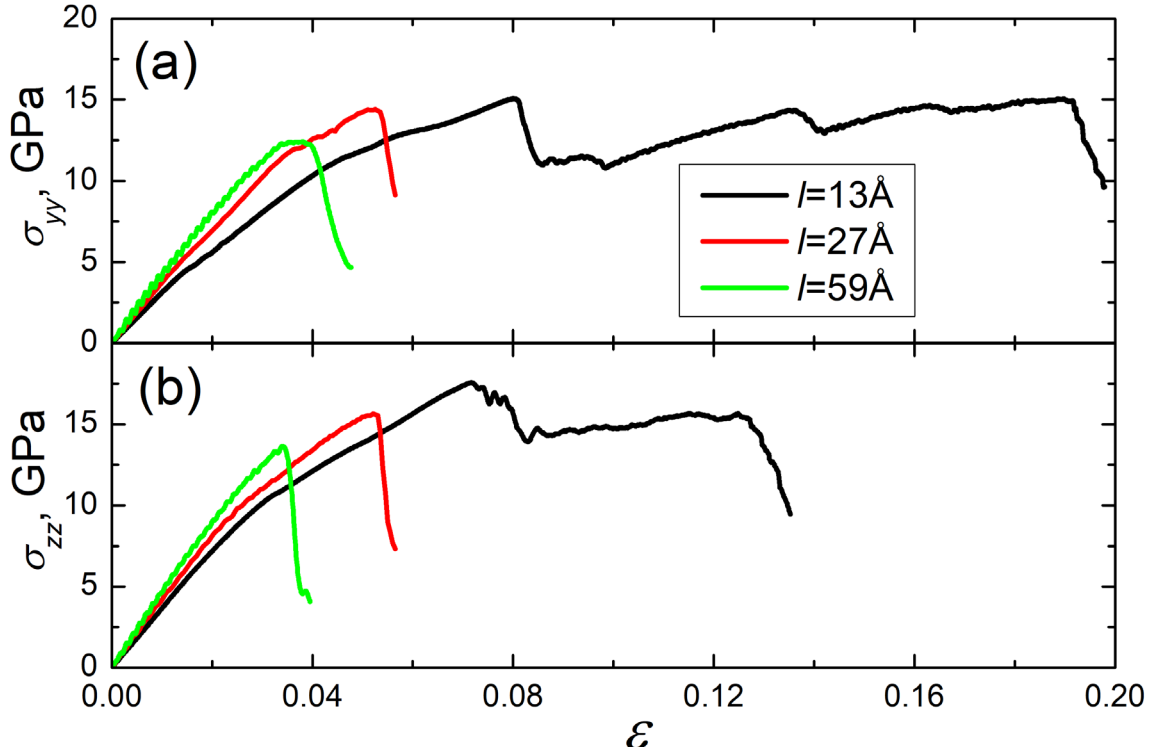


Рис. 2. График зависимости напряжения от деформации для композитных материалов с l = 13 (черный цвет), 27 (красный цвет) и 59 Å (зеленый цвет).

При рассмотрении деформации композитного материала с l = 13 Å (черная линия) видно, что напряжение и деформация разрыва у композита выше при деформации вдоль оси Y (Рис. 2, a), чем при деформации вдоль оси Z (Рис. 2, b), что свидетельствует об анизотропии механических свойств исследуемого композитного материала, что уже наблюдалось у такого же композита с никелевым наполнителем [5]. Данное явление может быть следствием шестигранной формы ячеек композита, что образует два направления суперсимметрии. Деформация композитов с большим размером плеча (27 Å и 59 Å) отличаются уже незначительно, что может быть следствием того, что влияние матрицы на механические свойства композита снижается и они начинают стремится к свойствам изотропного чистого кристалла меди.

Вторая важная закономерность заключается в том, что у композита с меньшим размером плеча большее напряжение разрыва и деформация разрыва (13 Å → 27 Å → 59 Å), что так же наблюдалось в работе [5].

Литература

1 Y. Xia, C. Gao, W. Gao. A review on elastic graphene aerogels: Design, preparation, and applications. J. Polym. Sci., 2022, 60(15) 2239-2261.

2 M. Wu et al. Superelastic graphene aerogel-based metamaterials. Nat. Commun., 2022, 13(1) 4561.

3. Y. Wu et al. Highly aligned graphene aerogels for multifunctional composites. Nano-Micro Lett., 2024, 16(1) 118.

4. X.W. Zhou, D.K. Ward, M.E. Foster. An analytical bond-order potential for carbon. J. Comput. Chem., 2015, 36(23) 1719-1735.

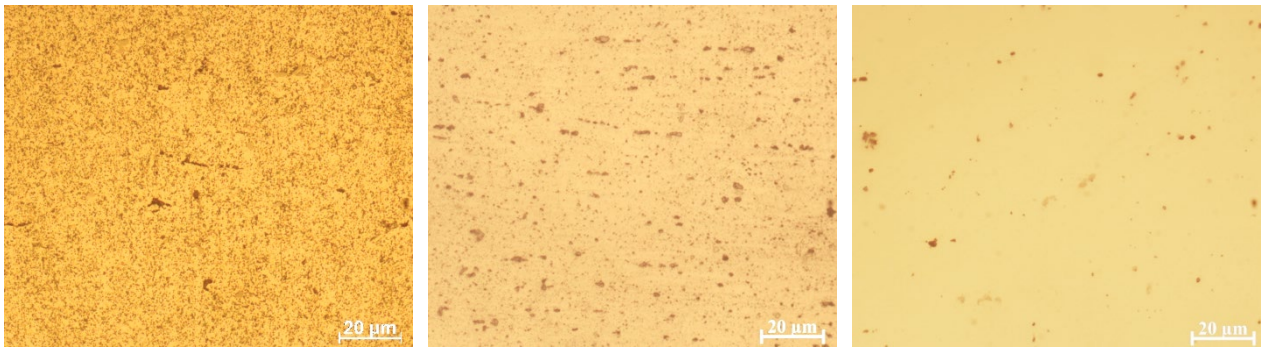
5. И.И. Тувалев, Р.Т. Мурзаев. Устойчивость и деформационное поведение композита на основе ячеистой структуры: молекулярная динамика. Фундам. пробл. совр. материаловед., 2024, 21(2) 188–198.

ВЛИЯНИЕ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА ЗЕРЕННУЮ СТРУКТУРУ И СВЕРХПЛАСТИЧНОСТЬ СПЛАВА Al–Mg–Zn–Cu–Cr–Zr С МИКРОДОБАВКОЙ СКАНДИЯ

З.С. Тураева, О.А. Яковцева, А.Д. Котов, А.В. Михайловская

Университет науки и технологий МИСиС, Москва, Россия
m1909900@edu.misis.ru

Высокопрочные алюминиевые сплавы системы Al-Zn-Mg-Cu (серия 7xxx) находят широкое применение в авиакосмической промышленности благодаря уникальному сочетанию низкой плотности и высокой прочности, достигаемой термической обработкой за счет выделения при старении метастабильных модификаций η-фазы. Сверхпластичные листы сплавов данной группы получены только при использовании технологии с гетерогенизационным отжигом и отличаются высокой остаточной пористостью и низкими скоростями формовки, поэтому редко используются в отличии от сплавов -магналиев на основе системы Al-Mg-Mn. Последние способны обеспечить сверхпластичное состояние листам без применения гетерогенизационного отжига, сверхпластичны при более высоких скоростях деформации и не склонны к порообразованию при формовке. Повышение комплекса эксплуатационных характеристик и показателей сверхпластичности сплавов данной группы возможно путем легирования переходными и редкоземельными металлами (Zr, Sc, Cr, Mn и др.), способствующими формированию наноразмерных интерметаллидных фаз, дисперсоидов. Дисперсоиды, обладая высокой термической стабильностью, стабилизируют субзеренную и зеренную структуру, в том числе $L1_2$ дисперсоиды со Sc и Zr могут сдерживать рекристаллизацию до подсолидусных температур, и обеспечивать дисперсионное упрочнение и сверхпластичное состояние [1]. Параметры формирующихся дисперсоидов критически зависят от режимов термомеханической обработки (ТМО) [2]. Сплавы перекрестного типа с повышенным соотношением Mg/Zn также способны упрочняться термической обработкой за счет метастабильных модификаций Т-фазы. Примером такого сплава является 1977, разработанный ВИЛС, однако его недостатком является повышенное содержание скандия более 0.15%. Сплавы с высоким соотношением Mg/Zn являются перспективными для разработки сверхпластичных сплавов и смогут соединить возможности сверхпластичных магналиев и высокопрочных сплавов.



а б в

Рис. 1. Микроструктуры в световом микроскопе образцов сплава Al-4.5Mg-3.5Zn-0.8Cu-0.2Mn-0.28Cr-0.15Zr-0.05Sc после горячей прокатки (а), отжига при 400°C, 8 ч (б) и закалки при 460°C (в)

В работе сравниваются три режима ТМО для сплавов Al-4.5Mg-3.5Zn-0.8Cu-0.2Mn-0.28Cr-0.15Zr и Al-4.5Mg-3.5Zn-0.8Cu-0.2Mn-0.28Cr-0.15Zr-0.05Sc. Содержание примесей в сплавах одинаково - 0.08Fe и 0.05Si. Гомогенизационный отжиг для обоих сплавов проводили по двухстадийному режиму: 360°C, 24 ч и 460°C, 3 ч. Далее слитки подвергали

трем вариантам ТМО: Режим 1 включал горячую прокатку и последующую холодную прокатку. Режим 2 дополнительно содержал промежуточный гетерогенизационный отжиг при 400°C в течение 8 ч между горячей и холодной прокаткой. Режим 3 предусматривал закалку с 460°C в воду после горячей прокатки, с последующей холодной прокаткой. Цель работы — оценить влияние режима ТМО на зеренную структуру и показатели сверхпластичности

После горячей прокатки (режим 1) происходит выделение частиц Т-фазы субмикронных размеров с долей около 8%. Гетерогенизация при 400°C (Режим 2) приводит к равномерному распределению выделений, с укрупнением частиц до 1 мкм, но снижением их объёмной доли до ~7%. Закалка с 460°C (Режим 3) растворяет Т фазу сохраняя объёмную долю (<2%) крупных частиц размерами несколько микрометров. Крупные частицы во всех режимах имеют кристаллизационное происхождение и одинаковую морфологию. Распределение частиц одинаково в сплаве со скандием и без него.

После холодной прокатки и рекристаллизационного отжига при 480°C структура сплава с микродобавкой скандия не зависит от режима обработки, сохраняются преимущественно нерекристаллизованные зерна. В процессе сверхпластической деформации реализуется динамическая рекристаллизация, что обеспечивает удлинения >450% при пониженных температурах (440–460°C) и повышенных скоростях деформации (до 1×10^{-2} c^{-1}).

В сплаве без скандия наименьший средний размер зерна 6 мкм обеспечивает режим 2 с гетерогенизацией против 9 мкм при использовании двух других режимов. Относительное удлинение также превышает 400%, но при более высокой температуре и скорости деформации $(1\text{-}2)\times10^{-3}$ c^{-1}

Работа выполнена в рамках проекта РНФ № 26-79-10167.

Литература

1. Robson, J. D., & Prangnell, P. B. Dispersoid precipitation and process modelling in zirconium containing commercial aluminium alloys. Acta Materialia, 2001, 49(4), 599-613.
2. Beigi Kheradmand, A., et al. Effect of Thermomechanical Treatment of Al-Zn-Mg-Cu with Minor Amount of Sc and Zr on the Mechanical Properties. Materials, 2022, 15(7), 2565.

ВЛИЯНИЕ МНОГОПРОХОДНОЙ ОБРАБОТКИ ТРЕНИЕМ С ПЕРЕМЕШИВАЕМ НА МИКРОСТРУКТУРУ СПЛАВА АА6063 И КОМПОЗИТА АА6063/TIO_2

Н.Ф. Хайретдинов[1], Д.Б. Кабирова[1], Б.М. Хасанов[2], М.Ф. Имаев[3]

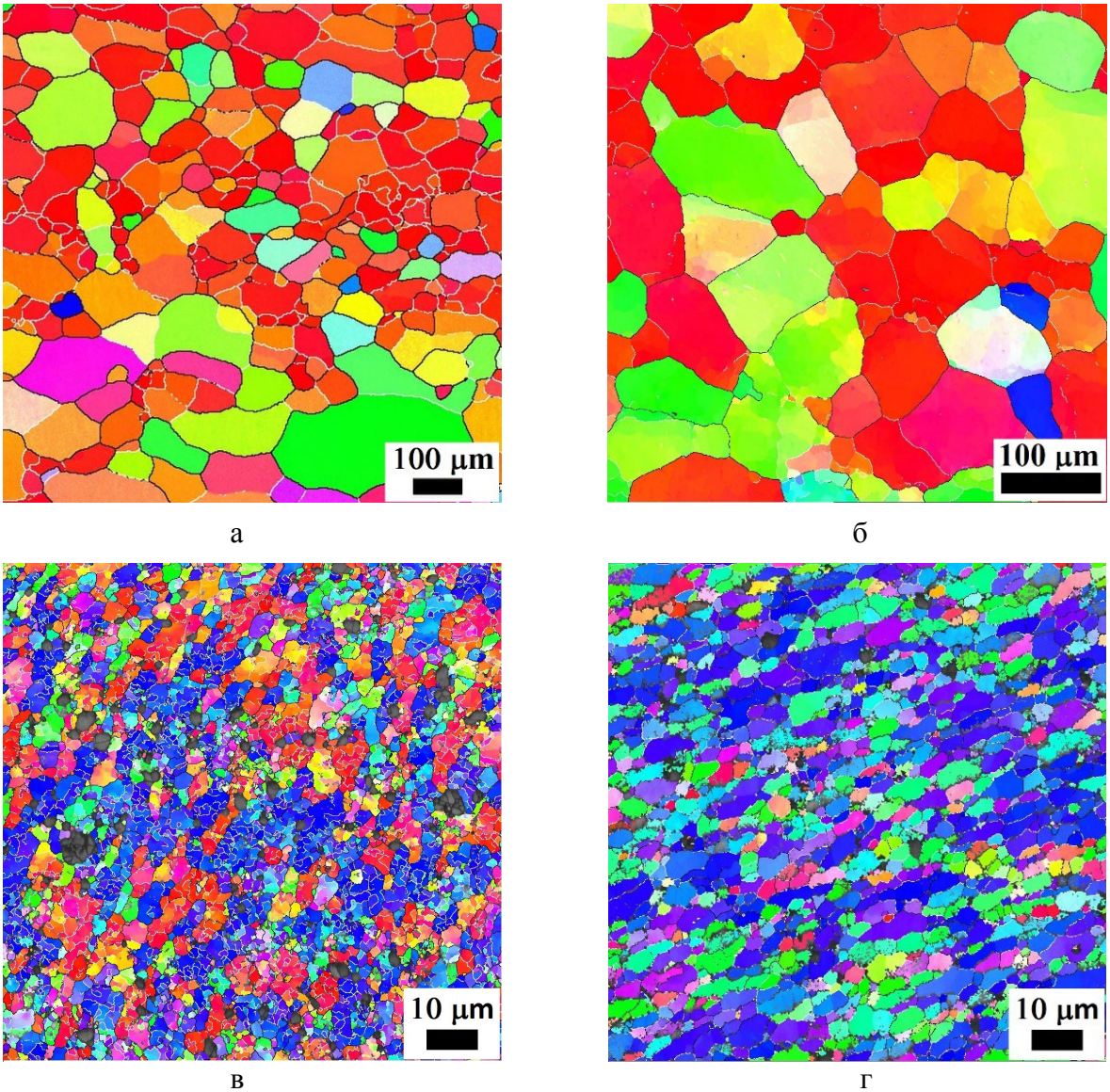
[1]*Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа*
[2]*Уфимский университет науки и технологий, Уфа*
[3]*Уфимский государственный нефтяной технический университет*
nafis@imsp.ru

Современное машиностроение предъявляет повышенные требования к конструкционным материалам, подвергающимся воздействию высоких механических нагрузок и температур. Металломатричные композиты (ММК) на основе алюминиевых сплавов являются одним из наиболее перспективных классов материалов благодаря сочетанию низкой плотности, высокой удельной прочности и технологичности. Введение в мягкую металлическую матрицу твердых армирующих частиц позволяет достичь эффекта, недостижимого в монолитных сплавах. Одним из наиболее эффективных методов синтеза и модификации ММК является обработка трением с перемешиванием (ОТП) (*Friction Stir Processing, FSP)*. ОТП представляет собой твердофазный процесс, основанный на интенсивной пластической деформации и локальном нагреве материала, ниже температуры его плавления. Метод позволяет получать беспористые и однородные композиты с ультрамелкозернистой (УМЗ) структурой. Однако последующая термическая обработка, необходимая для снятия внутренних напряжений или достижения пиковых прочностных характеристик (например, по режиму Т6 на максимальную прочность), может инициировать рекристаллизацию, приводящую к аномальному росту зерен и деградации свойств [1, 2, 3]. Понимание механизмов стабилизации УМЗ структуры важно для получения материалов со стабильными и прогнозируемыми характеристиками. Целью данной работы явилось исследование эволюции микроструктуры сплава АА6063 и его композита с TiO_2 при многопроходной ОТП и термической обработке Т6.

В качестве объекта исследования использовали листы алюминиевого сплава АА6063 толщиной 2 мм. В качестве армирующего наполнителя применили мелкодисперсный порошок диоксида титана TiO_2. Размер агломератов порошка не превышал 10 мкм. Для введения армирующих частиц в матрицу на фрезерном станке в листе сплава вырезали шесть параллельных пазов шириной 1 мм и глубиной 1,5 мм. Пазы заполняли порошком TiO_2, после чего их герметизировали путем заварки заплечником инструмента без пина. ОТП выполняли многопроходным методом (2, 4, 10, 20 проходов) с последующим отжигом по режиму Т6. Для структурно-фазового анализа использовали метод дифракции обратно-рассеянных электронов (EBSD) на растровом электронном микроскопе. Образцы для EBSD анализа вырезали перпендикулярно направлению обработки и подготавливали по стандартной методике. Анализ данных включал построение карт ориентировок структуры (IPF-карты), карт рекристаллизации и гистограмм распределения границ зерен по углам разориентировки. В качестве порогового значения, разделяющего малоугловые границы (МУГ) от большеугловых (БУГ), принимали разориентировку в 15°. Для повышения достоверности данных из анализа автоматически удаляли зерна площадью менее четырёх пикселей.

Исходная микроструктура сплава в отожженном состоянии рекристаллизованная со средним размером зерен ~50 мкм. Многократное прохождение инструмента через материал приводит к накоплению огромной плотности дислокаций и формированию ячеистой структуры. Этот процесс фрагментирует исходные крупные зерна до ультрамелкозернистого состояния. Уже после двух проходов средний размер зерен снижается до 5,8 мкм, а после 20 — до 2,7–2,9 мкм.

Однако процесс структурообразования носит нелинейный характер. Наиболее критический режим зафиксирован после четырёх проходов ОТП с последующей термообработкой Т6. В этом состоянии наблюдается аномальный рост зерен до ~70 мкм (рисунок 1а, б). Термообработка выступает мощным триггером для завершения процессов, начатых деформацией. Нагрев обеспечивает кристаллической решетке необходимую подвижность для перераспределения дефектов. Наблюдается четкая тенденция: доля деформированных зерен падает (с 6% до 3%), а доля рекристаллизованных возрастает (с 34% до 58%). Субзеренная структура также трансформируется, ее доля может как уменьшаться (с 60% до 39%), так и увеличиваться в зависимости от режима, что указывает на сложные процессы возврата и полигонизации.



а б в г

Рис. 1. IPF-карты после ОТП и последующего отжига Т6:
а - АА6063 в исходном состоянии; б - АА6063 после 4 проходов ОТП; в – АА6063/TiO_2, 2 прохода; г - АА6063/TiO_2, 20 проходов.

Исследование эволюции микроструктуры показало, что структура сплава в исходном состоянии характеризуется полосчатой неоднородностью с широким диапазоном размеров зерен (10–150 мкм). После ОТП неоднородность приобретает зональный характер. В зоне

термомеханического воздействия формируется ультрамелкозернистая структура со средним размером зерен, не превышающим 3 мкм. В зоне термического воздействия наблюдается аномальный рост зерен до 100–150 мкм. Эффект сильного роста небольшого числа зерен, вероятно, связан с локальным накоплением критической плотности дефектов и энергии деформации в ходе ОТП, что при последующем нагреве, создает условия для преимущественного роста отдельных зерен, обладающих, по-видимому и определенной ориентировкой [3], способствующими их быстрому росту за счет поглощения соседних зерен. При дальнейшем увеличении числа проходов до 10 и 20 микроструктура стабилизируется, а размер зерен достигает уровня ~2,8-2,9 мкм.

Введение частиц TiO_2 кардинально меняет характер микроструктурных изменений в материале. Во-первых, частицы оказывают тормозящее воздействие на границы зерен уже на этапе ОТП, что приводит к еще более интенсивному измельчению микроструктуры по сравнению со сплавом при том же числе проходов (например, ~1,5 мкм против ~5,8 мкм после 2 проходов). Во-вторых, частицы TiO_2 полностью подавляют аномальный рост зерен при всех исследованных режимах. Даже после термообработки образца с четырьмя проходами ОТП размер зерен остается на уровне ~2,2 мкм (рисунок 1 в).

EBSD-анализ показал существенные различия в эволюции дефектной структуры в сплаве и композите. В сплаве после 1-3 проходов преобладает субзеренная структура (доля до 97%). С увеличением числа проходов растет доля рекристаллизованных зерен. В композите доля субзерен остается стабильно высокой даже после большого числа проходов и термообработки, что подтверждает стабилизирующий эффект частиц. Распределение границ по углам разориентировки для обоих материалов имеет бимодальный характер с максимумами в области МУГ (~7°) и БУГ (~55°) границ. Доля МУГ в композите стабилизируется на уровне ~30%, что свидетельствует о высокой степени деформационной проработки и стабильности субзеренной структуры.

Многопроходная ОТП является эффективным методом формирования ультрамелкозернистой структуры в алюминиевом сплаве АА6063, обеспечивая измельчение зерен в ~18 раз (с ~48 мкм до ~2,7 мкм). В сплаве АА6063 после четырёх проходов ОТП и последующей термообработки наблюдается аномальный рост зерен до ~70 мкм. Введение частиц TiO_2 в матрицу сплава существенно влияет на изменения микроструктуры при ОТП и термообработке Т6: подавляется аномальный рост зерен и обеспечивается высокая термическая стабильность ультрамелкозернистой структуры. Наиболее стабильная мелкозернистая микроструктура со средним размером зерен ~2,7 мкм формируется в композите после 20 проходов ОТП и последующей термообработки, что делает данный режим оптимальным для получения материалов с высокими механическими свойствами.

Таким образом, применение многопроходной ОТП в сочетании с армированием частицами TiO_2 является перспективным подходом для создания термически стабильных ММК на основе алюминиевых сплавов системы Al-Mg-Si.

Литература

1. G.K. Padhy, C.S. Wu, S. Gao. Friction stir based welding and processing technologies - processes, parameters, microstructures and applications: A review. J. Mater.Sci. Technol. 2018, 34(1) 1-38.
2. Tao Wang, Yong Zou, Kenji Matsuda. Micro-structure and micro-textural studies of friction stir welded AA6061-T6 subjected to different rotation speeds. Mater. Design. 2016, 90 13-21.
3. S. Mironov, Y.S. Sato, H. Kokawa. Grain structure evolution during friction-stir welding. Phys. Mesomech. 2019, 22(1) 2-14.

ПОВЫШЕНИЕ ЭРОЗИОННОЙ СТОЙКОСТИ ВОЛЬФРАМА К ВОЗДЕЙСТВИЮ ИОНОВ ГЕЛИЯ ЗА СЧЕТ ФОРМИРОВАНИЯ В НЕМ УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОЙ СТРУКТУРЫ И КОНУСООБРАЗНОГО РЕЛЬЕФА ПОВЕРХНОСТИ

Р.Х. Хисамов[1], Н.Н. Андрианова[2, 3], А.М. Борисов[2, 3], М.А. Овчинников[2], Р.Р. Мулюков[1]

[1]*Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа*
[2]*Научно-иследовательский институт ядерной физики МГУ, Москва*
[3]*Московский авиационный институт, Москва*
r.khisamov@mail.ru

Ионно-индуцированная эрозия обращенных к плазме внутренних стенок представляет значительную проблему для термоядерного реактора. В находящемся на финальном этапе строительства международном экспериментальном термоядерном реакторе ITER, материалом обращенных к плазме внутренних стенок является вольфрам. Большую роль в эрозии будут играть ионы He^+ (продукт D-T реакции), достигающие стенок из периферийных областей плазмы и имеющие энергии от десятков эВ до десятков кэВ. При высокодозном воздействии ионами He^+ с энергиями порядка 1-10 кэВ будет происходить деградация поверхности стенок – блистеринг – образование блистеров (волдырей) с последующей эксфолиацей (отслаивание крышек блистеров). Попадание частиц вольфрама в плазму в результате эксфолиации блистеров, приповерхностных слоев, также как и атомов вольфрама в результате распыления, будет приводить к «охлаждению» плазмы и снижению эффективности работы реактора. Эрозионную стойкость материала стенки к воздействию ионов He^+ можно повысить модификацией приповерхностной структуры, либо изменением морфологии поверхности.

Показано влияние ультрамелкозернистой структуры в вольфраме и конусообразного рельефа его поверхности на образование блистеров, их эксфолиацию, коэффициент физического распыления при высокодозном воздействии ионами He^+. Образцы вольфрама с ультрамелкозернистой (УМЗ) структурой с размером зерен 100-400 нм получили с помощью интенсивной пластической деформации методом кручения под высоким давлением. Для сравнения использовали мелкозернистые (МЗ) образцы с размером зерен 7 мкм, которые получили отжигом УМЗ образцов при 1500°С [1,2]. Для формирования конусообразного рельефа поверхности образцы облучали ионами Ar^+ (энергия 30 кэВ, флюенс $6\cdot10^{18}$ ион/см^2), для образования блистеров – ионами He^+ (энергия 30 кэВ, флюенс $1\cdot10^{18}$-$6\cdot10^{19}$ ион/см^2) [1-3]. Микроструктуру образцов и морфологию поверхности исследовали с помощью РЭМ.

В результате облучения ионами He^+ с флюенсом $1\cdot10^{18}$ ион/см^2 на поверхности как МЗ, так и УМЗ образца образовались блистеры. На МЗ образце средний диаметр блистеров составляет 1 мкм. Часть блистеров не имели крышек, что явилось следствием их эксфолиации (Рис.1а). На УМЗ образце средний диаметр блистеров составляет 400 нм, что сопоставимо с размером зерен в нем. Все блистеры сохранили свои крышки, что свидетельствует об отсутствии эксфолиации на этом образце (Рис.1б). Длительное облучение МЗ образца с флюенсом $6\cdot10^{19}$ ион/см^2 приводит к формированию на зернах губчатой, пористой структуры, состоящей из кратеров (разрушенные блистеры) диаметром около 1 мкм и глубиной до 500 нм (Рис.1в). Поверхность УМЗ образца после длительного облучения с флюенсом $5\cdot10^{18}$ ион/см^2 характеризуется более однородным рельефом с хаотично расположенными кратерами диаметром от нескольких сотен нм до 1 мкм и глубиной до 500 нм (Рис.1г).

На рисунке 1д представлена зависимость удельной потери массы m_s от флюенса облучения, где $m_s=m/S$ (S=0.3 см^2). Интенсивная эрозия (высокая потеря массы m_s) на МЗ образце, связанная с эксфолиацией блистеров, происходит при флюенсе $3\cdot10^{19}$ ион/см^2. Потеря массы m_s за счет эксфолиации блистеров на порядок превышает величину потери массы m_s, обусловленная физическим распылением. На УМЗ образце, судя по измерениям

потери массы, эксфолиация блистеров не происходит, что подтверждаются РЭМ исследованиями (Рис.1б).

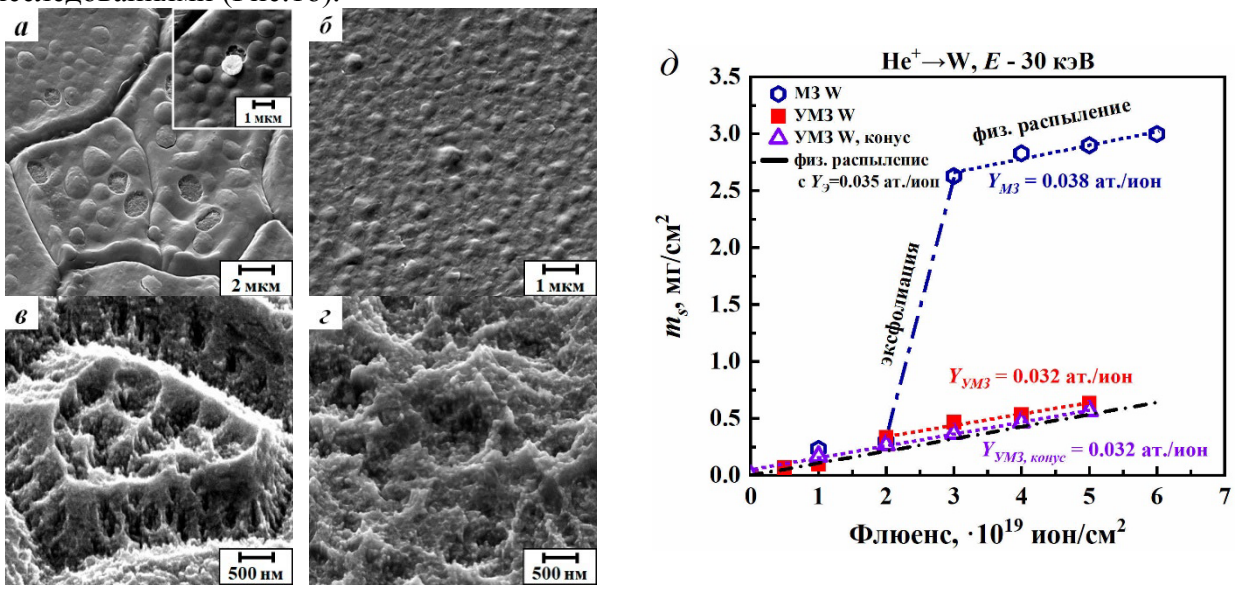


Рис. 1. РЭМ изображения поверхности МЗ (*а,в*) и УМЗ (*б,г*) вольфрама после облучения ионами He^+ с энергией 30 кэВ с флюенсом $1\cdot10^{18}$ ион/см^2 (*а,б*) и $(5\text{-}6)\cdot10^{18}$ ион/см^2 (*в,г*), (*д*) зависимость удельной потери массы m_s от флюенса облучения для МЗ, УМЗ образца с гладкой поверхностью и УМЗ образца с конусообразным рельефом поверхности

При флюенсах облучения выше $3\cdot10^{19}$ ион/см^2 блистеры на поверхности как на МЗ, так и УМЗ образца не образуются. Эрозия поверхности образцов при этих флюенсах происходит за счет физического распыления, что отражается на пологом наклоне зависимостей потери массы m_s от флюенса для МЗ и УМЗ образца при флюенсе выше $3\cdot10^{19}$ ион/см^2. Значение коэффициента физического распыления Y (отношение числа выбитых атомов к числу упавших ионов), рассчитанное с помощью выражения $Y=\Delta m_s N_a/(M\Delta\Phi)$ [4], где Δm_s – удельная потеря массы, N_a – число Авогадро, M – молярная масса, $\Delta\Phi$ – флюенс облучения, для МЗ образца составляет $Y_{МЗ}$ = 0.038±0.06 атом/ион, для УМЗ образца – $Y_{УМЗ}$ = 0.032±0.003 атом/ион. Значения коэффициентов Y для обоих образцов близки к теоретическому значению коэффициента распыления $Y_Э$=0.035 атом/ион для распыления вольфрама ионами He^+ с энергией 30 кэВ [4]. Близкие значения коэффициентов физического распыления МЗ и УМЗ вольфрама свидетельствуют о слабой зависимости коэффициента распыления Y от размера зерен при облучении ионами He^+. Обнаруженное различие в диаметре блистеров, их эксфолиации, на МЗ и УМЗ образцах обусловлено различиями их структуры. Повышенная концентрация кристаллических дефектов, удельная доля границ зерен в УМЗ образце, являющиеся стоками для ионов He^+, способствует перераспределению ионов He^+ в приповерхностном слое, что сдерживает чрезмерный рост диаметра блистеров и предотвращает их эксфолиацию, что коррелирует с данными [4].

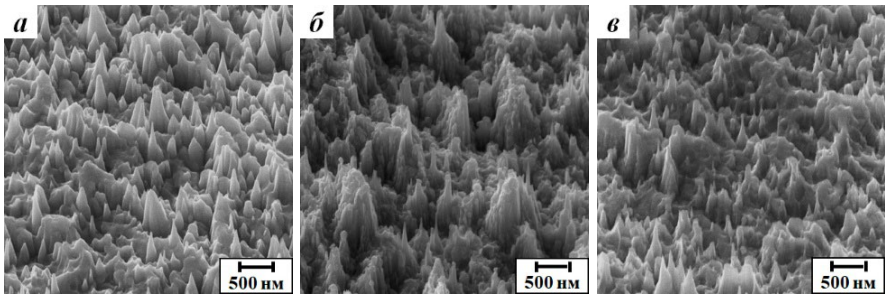


Рис. 2. РЭМ изображения поверхности УМЗ вольфрама с конусообразным рельефом до (*а*) и после облучения ионами He^+ с энергией 30 кэВ с флюенсом (*б*) $1\cdot10^{19}$ и (*в*) $5\cdot10^{19}$ ион/см^2

На рисунке 2а представлено РЭМ изображение конусообразного рельефа поверхности на УМЗ образце, сформированного облучением ионами Ar^+ (энергия 30 кэВ, флюенс $6\cdot10^{18}$ ион/см^2) [2]. В результате облучения ионами He^+ с флюенсом $1\cdot10^{18}$ ион/см^2 конусообразный рельеф поверхности на УМЗ образце сохранился. Блистеры, которые образуются на УМЗ образце с гладкой поверхностью, на конусообразном рельефе поверхности отсутствовали. Облучение с флюенсом $1\cdot10^{19}$ ион/см^2 также не приводило к образованию блистеров (Рис.2б). При облучении с флюенсом $5\cdot10^{19}$ ион/см^2 (Рис.2в) кратеры, поры, являющиеся следствием разрушения крышек блистеров, также отсутствовали.

Измерения удельной потери массы УМЗ образца с конусообразным рельефом поверхности при облучении ионами He^+ с энергией 30 кэВ в диапазоне флюесов от $(1\text{-}5)\cdot10^{19}$ ион/см^2 (Рис.1*д*) показали, что величина m_s в измеренном диапазоне флюенсов увеличивалась монотонно, что свидетельствует о физическом распылении этой поверхности. Коэффициент распыления Y конусообразного рельефа поверхности на УМЗ образце в исследованном интервале флюенсов $(1\text{-}5)\cdot10^{19}$ ион/см^2 составил 0.032±0.005 атом/ион.

Ионами He^+ с энергией 30 кэВ с флюенсом $1\cdot10^{18}$ ион/см^2 также облучили МЗ образец, который предварительно был облучен ионами Ar^+ с энергией 30 кэВ с флюенсом $9\cdot10^{18}$ ион/см^2 (Рис.3). На поверхности зерен с относительно гладким рельефом наблюдаются блистеры диаметром единицы мкм (Рис.3а). Некоторые блистеры были без крышек, аналогично блистерам без крышек на МЗ образце с гладкой поверхностью. На тех зернах, где располагается множество конусов, блистеры отсутствуют (Рис.3б).

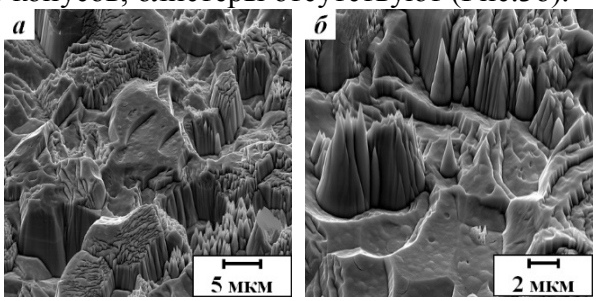


Рис. 3. РЭМ изображения МЗ вольфрама после предварительного облучения 30 кэВ ионами Ar^+ с флюенсом $9\cdot10^{18}$ ион/см^2 и последующего облучения 30 кэВ ионами He^+ с флюенсом $1\cdot10^{18}$ ион/см^2

Формирование ультрамелкозернистой структуры в вольфраме, являющегося материалом внутренней стенки термоядерного реактора, позволяет уменьшить диаметр блистеров и предотвратить их эксфолиацию, а создание однородного конусообразного рельефа на его поверхности подавить блистеринг при облучении ионами He^+ кэВ-ными энергиями.

Благодарности. Работа Р.Х. Хисамова, Р.Р. Мулюкова выполнена в рамках государственного задания ИПСМ РАН, работа Н.Н. Андриановой, А.М. Борисова, М.А. Овчинникова выполнена в рамках государственного задания МГУ имени М.В. Ломоносова. Исследования выполнены на базе ЦКП ИПСМ РАН “Структурные и физико-механические исследования материалов” и “Ускорительного комплекса МГУ”.

Литература

1. R.Kh. Khisamov, N.N. Andrianova, A.M. Borisov, M.A. Ovchinnikov, R.R. Mulyukov. Effect of Grain Size and Texture of Polycrystalline Tungsten on Its Ion-Beam Sputtering J. Surf. Investig., 2025, 19(1), 179-189.
2. R.Kh. Khisamov, N.N. Andrianova, A.M. Borisov, M.A. Ovchinnikov, I.I. Musabirov, R.R. Timiryaev, R.R. Mulyukov. Structural Suppression of Blister Formation on the Surface of Tungsten under 30-keV He+-Ion Implantation. J. Surf. Investig., 2025, 19(2), 497-503.
3. http://beam.sinp.msu.ru/
4. Р. Бериш. Распыление твердых тел ионной бомбардировкой II. М.: Мир, 1986, 488 с.

ВЛИЯНИЕ КОМБИНИРОВАННОГО МЕТОДА РКУП+ЭКСТРУЗИЯ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА БИОМЕДИЦИНСКОГО СПЛАВА MG-ZN-CA

Г.Д. Худододова, Р.К. Исламгалиев, Р.З. Валиев

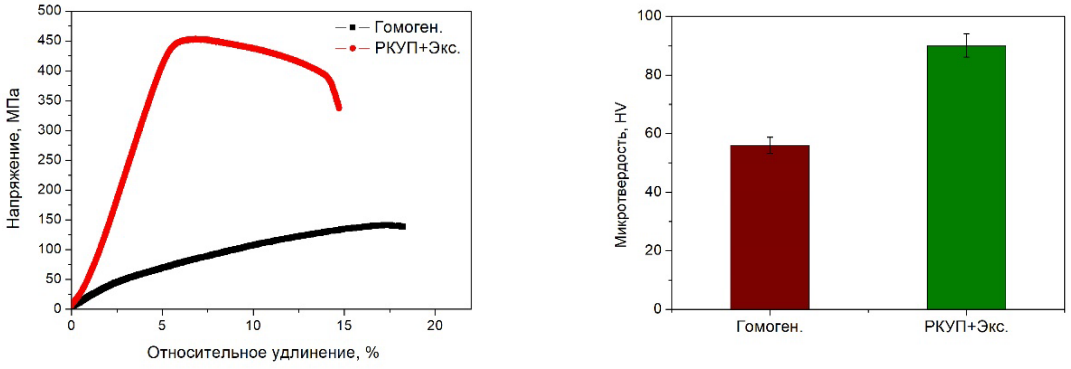
Уфимский университет науки и технологий, Уфа
khudododova.gd@gmail.com

В области разработки новых имплантатов решающее значение имеют биомедицинские металлические материалы. Металлические материалы обладают достаточной механической прочностью, чтобы выдерживать приложенные напряжения и нагрузки, в отличие от полимерных и керамических материалов [1]. Материалы на основе магния относятся к числу биоразлагаемых материалов, обладающих также биосовместимостью, поскольку их модуль упругости ближе к модулю упругости кости [2]. Однако у чистого магния есть недостатки, связанные с низкой прочностью и высокой скоростью коррозии в физиологических средах. Для увеличения прочности обычно применяют легирование и различные методы деформационно-термической обработки. В настоящей работе в качестве материала для исследований был выбран магниевый сплав Mg-1Zn-0,2Ca, в состав которого входят элементы Zn и Ca, которые являются биосовместимыми.

В данной работе для увеличения механических свойств (прочность и твердость) магниевого сплава Mg-1%Zn-0,2%Ca (вес.%) использован комбинированный метод обработки РКУП + экструзия (РКУП+Э). Исходные образцы после гомогенизации подвергали РКУП+Э при температуре 400°C, далее следовало дополнительное РКУП, 4 прохода при температуре 350°C, после которой общая степень деформации составила 6,4. Затем были проведены дополнительная экструзия при температуре 200°C, для получения длинномерного прутка диаметром 5 мм длиной 1000 мм.

Исследуемые материалы были испытаны на одноосное растяжение на малых образцах с длиной рабочей части 4 мм и толщиной 1 мм при комнатной температуре со скоростью 10^{-3} $с^{-1}$ на электромеханической измерительной системе Instron 5982 (Instron, США). Измерения микротвердости были проведены с шагом 1 мм по всей площади образца на установке Micromet 5101.

Согласно данным механических испытаний на растяжение (рис. 1а) предел прочности повысился с 145 МПа (для гомогенизированного образца) до 440 МПа (после РКУП+Э) с сохранением пластичности до 11% и одновременным повышением микротвердости с 46 HV до 90 HV (рис.1б), соответственно.



а б

Рис. 1. а) Прочностные свойства до и после РКУП+Э; б) микротвердость магниевого сплава Mg-1%Zn-0.2%Ca до и после РКУП+Э.

ПЭМ исследования показали, что значительное повышение прочности и твердости после деформационной обработки РКУП+Э обусловлено сильным измельчением зеренной структуры до миронных размеров, а также присутствием наночастиц $Ca_2Mg_6Zn_3$ обеспечивающих дисперсионное упрочнение.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда № 24-43-20015.

Литература

1. M.K. Egbo. A fundamental review on composite materials and some of their applications in biomedical engineering. J King Saud Univ. Eng. Sci., 2021, 33, 557-568.
2. C.A. Niranjan, T. Raghavendra, M.P. Rao, et al. Magnesium alloys as extremely promising alternatives for temporary orthopedic implants – a review. J Magnesium Alloys. 2023, 11, 2688-2718.

АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ И ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА ПОВЕРХНОСТИ ПЕРЕЗАРЯДНЫХ ФОЛЬГ, ПОДВЕРГНУТЫХ ВОЗДЕЙСТВИЮ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА

И.А. Царева, В.В. Мокрушин, А.Е. Канунов, О.Ю. Забродина, А.В. Орехов

Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики (ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»), г. Саров Нижегородской обл.
iatsareva@vniief.ru

Углеродные фольги представляют собой многослойные плёнки, полученные методом электродугового распыления графитовых стрежней в вакууме на стеклянные подложки, армированные с одной стороны клеевым слоем [1]. Фольги находят применение в качестве перезарядных мишеней в ускорителях заряженных частиц, в частности, в циклотронах. Способ изготовления плёнок и принцип реализации – перезаряда пучков заряженных частиц, например, гидрид-ионов – в протоны, более подробно описан в [2].

Целью представляемой работы являлось исследование влияние воздействия пучка высокоэнергетических электронов, моделирующих облучение потоком заряженных частиц, на структуру поверхности углеродной фольги.

Методами сканирующей электронной микроскопии и рентгеновского спектрального микроанализа проведён сравнительный анализ структуры и текстуры поверхности образцов углеродных плёнок с плотностью 290 мкг/см^2 до и после облучения пучком электронов с энергией 10 кэВ [2].

На рисунке 1 представлена схема образца углеродной фольги, закреплённого на алюминиевой рамке, с обозначением места крепления углеродной плёнки и указанием сторон А и В по направлению воздействия пучка. Зона воздействия электронного пучка схематично отмечена окружностью.

В результате исследования установлены особенности структуры слоёв и текстуры поверхности образцов плёнок, а также элементный химический состав со стороны рабочей поверхности. Проведено электронно-микроскопическое (ЭМ) исследование случайного слома, трещин и торцевой поверхности образца. На рисунке 2 показана многослойная структура плёнки в локальной области вблизи боковой поверхности. Измерена толщина плёнки (рисунок 3), которая составила ~(1,2-2,0) мкм и ~(0,4-0,9) мкм для отдельных слоёв. Данные по измерениям толщины хорошо согласуются с расчётными значениями плотности материала плёнок.

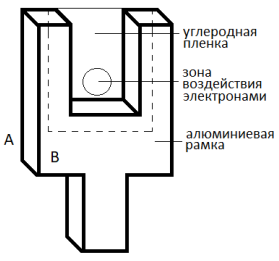


Рис. 1. Схема конструкции образца углеродной фольги, закрепленной на алюминиевой рамке

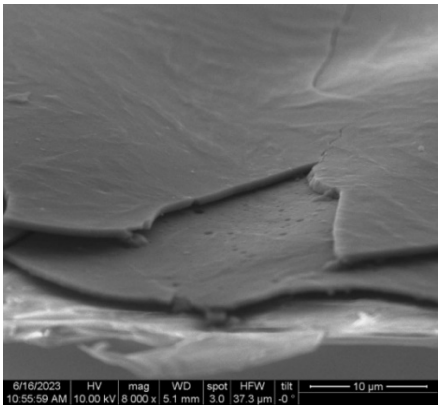


Рис. 2. ЭМ изображение поверхности образца плёнки до облучения

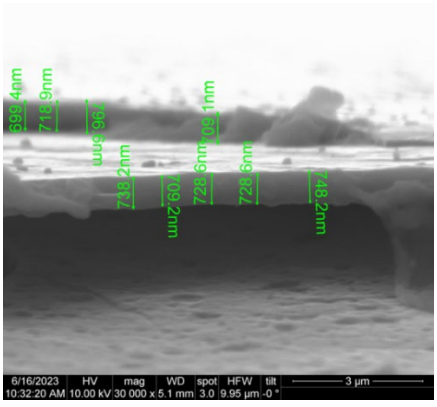


Рис. 3. ЭМ изображение боковой поверхности образца плёнки плотностью 290 мкг/см^2 с указанием геометрических размеров

На рисунках 4 и 5 показаны изменения поверхности плёнки после воздействия электронного пучка диаметром 6–7 мм.

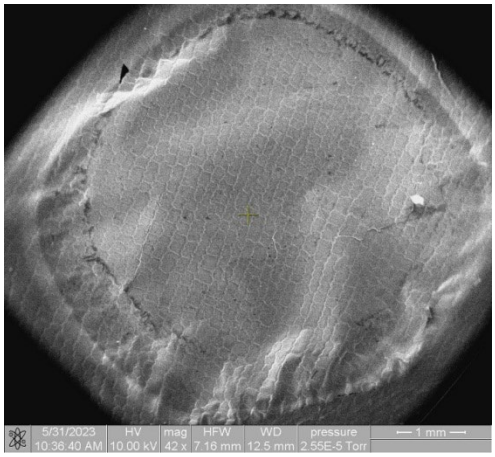


Рис. 4. ЭМ изображение фрагмента поверхности в области воздействия пучка (сторона А) при увеличении 42×

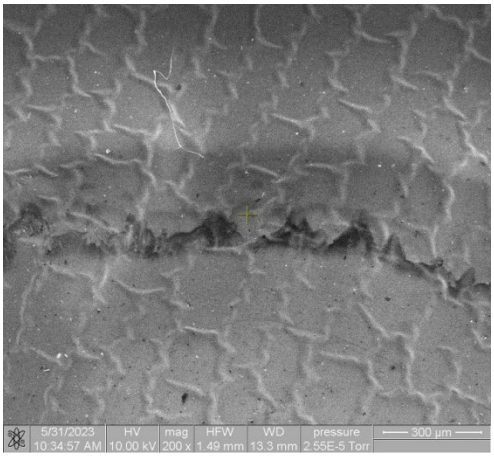


Рис. 3. ЭМ изображение фрагмента поверхности в области воздействия пучка (сторона А) при увеличении 100×

В результате наблюдения за изменением структуры и текстуры поверхности плёнки, а также её элементного химического состава до и после воздействия, установлено, что в области воздействия пучка диаметром 6–7 мм произошло нарушение целостности плёнки (коробление, растрескивание и расслоение). На стороне В произошла частичная деструкция клеевого слоя с потерей кислородсодержащих функциональных групп, содержание кислорода снизилось с 22,7 до 2,2 мас.% (в 10 раз), так что повреждённая зона отделилась (выкрошилась) по границе области воздействия.

На два порядка увеличилось содержание алюминия как на стороне А, так и на стороне В. Это могло быть вызвано сублимацией алюминия и его диспергированием при воздействии периферии потока электронов на рамку с последующим осаждением в области пятна. Появление вольфрама в области воздействия пучка может быть связано с его переносом в электронном потоке при использовании вольфрамового термоэмиссионного катода, обеспечивающего первичную эмиссию электронов.

Результаты работы могут быть использованы для усовершенствования технологии получения перезарядных углеродных фольг и увеличения срока их службы в ускорителях заряженных частиц.

Литература

1. Официальный сайт АО «Научно-исследовательский институт электрофизической аппаратуры имени Д.В. Ефремова». – Интернет-ресурс: http://www.niiefa.spb.su; дата обращения 01.09.2023.
2. З.Г. Люллин, С.А. Трифонов, С.В. Григоренко, Д.К. Кострин, В.В. Мокрушин, И.А. Царева, А.Е. Канунов, И.В. Гольтяев. Исследование влияние высокоэнегретического пучка электронов на поверхность углеродных фольг. М.: Заводская лаборатория. Диагностика материалов, 2026. 47 с.

СТРУКТУРА, ФИЗИКО–МЕХАНИЧЕСКИЕ И ТРИБОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА УПРОЧНЕННЫХ КАРБИДНЫМИ И ОКСИДНЫМИ ЧАСТИЦАМИ АЛЮМОМАТРИЧНЫХ КОМПОЗИТОВ

Т.С. Черкасова[1], С.В. Гладковский[1], Р.А. Саврай[1], С.В. Петрова[1], А.В. Протасов[2]

[1] *Институт машиноведения имени Э.С. Горкунова Уральского отделения Российской академии наук, Екатеринбург*

[2] *Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, Екатеринбург*

cherkasova@imach.uran.ru

В настоящее время к эффективным твердофазным методам получения алюмоматричных композитов (АМК) с улучшенными физико-механическими и эксплуатационными характеристиками относятся: горячее прессование (ГП) и искровое плазменное спекание (ИПС). Эти технологии позволяют надежно контролировать процессы спекания, уменьшать пористость и обеспечивать однородное распределение упрочняющих фаз в матрице [1]. Исследование влияния указанных методов на формирование структуры и свойств АМК состава Al–25%B_4C, Al–25%SiC, Al–25%Al_2O_3 (тип 1) и Al–25%Al_2O_3 (тип 2) является актуальной задачей, поскольку сочетание механической прочности и износостойкости расширяет область применения данных материалов в различных отраслях, включая авиационную промышленность, автомобилестроение и машиностроение. Размер частиц алюминиевого порошка марки ПА–4 варьировался в диапазоне 25–130 мкм, B_4C – 5–13 мкм, SiC – 90–150 мкм, Al_2O_3 – 4–8 мкм (тип 1) и Al_2O_3 – 80–250 мкм (тип 2). Компактирование порошка алюминия и получение АМК на его основе методом ГП проводилось в ЦКП «Пластометрия» ИМАШ УрО РАН, а ИПС – в ИФМ УрО РАН.

Изучение структуры исследуемых материалов, проведенное на нетравленых шлифах методом оптической металлографии, выявило различия в характере распределения мелкодисперсных частиц карбида бора и оксида алюминия (тип 1) по сравнению с крупнодисперсными частицами карбида кремния и оксида алюминия (тип 2) в алюминиевой матрице. В отличие от равномерно распределенных в алюминиевой матрице крупных частиц SiC и Al_2O_3 (тип 2), мелкие частицы B_4C и Al_2O_3 (тип 1) распределены в матрице неравномерно и часто концентрируются по границам или на тройных стыках алюминиевых частиц в виде агломераций и непрерывных цепочек. Данная тенденция характерна для порошковых композитов независимо от способа их получения. Показатели расчетной плотности (ρ) и общей пористости ($П_{общ.}$) определяли в соответствии с ГОСТ 20018–74 методом взвешивания образцов на воздухе и в воде. Полученные результаты (табл.) свидетельствуют о том, что наибольшие значения относительной плотности ($ρ_{отн.}$) в пределах 98,5–99,3% достигаются на спечённом чистом алюминии. Для всех исследованных АМК значения $ρ_{отн.}$ варьируют в интервале 85,4–97,8%. При этом наибольшие значения относительной плотности среди композитов наблюдаются у образцов, армированных крупными частицами SiC и Al_2O_3 (тип 2). Выявленные наименьшие пониженные значения $ρ_{отн.}$ характерны для композитов, упрочнённых мелкодисперсными частицами B_4C и Al_2O_3 (тип 1). Пониженная плотность последних объясняется склонностью высокодисперсных порошковых фракций к агломерации, что приводит к увеличенной пористости ($П_{общ}$ = 5,7–14,6 %).

Результаты замера микротвердости композитов методом Виккерса на приборе Shimadzu HMV-G21DT при нагрузке 490,3 мН (0,05 кгс), представленные в таблице, выявили различия в воздействии применяемых методов получения композитов на их микротвердость в зависимости от размера вводимых упрочняющих частиц. Введение мелкодисперных частиц B_4C и Al_2O_3 (тип 1) в композиты, полученных ГП, способствует более высокому повышению значений микротвердости, чем добавка крупных частиц SiC и Al_2O_3 (тип 2). Рост значений

микротвердости в этих композитах связан с измельчением зеренной структуры алюминия в процессе деформирования [2]. Площадь зоны пластического деформирования вокруг керамических мелкодисперсных частиц B_4C и Al_2O_3, где инициируются процессы динамической полигонизации и рекристаллизации, превосходит площадь вокруг крупнодисперсных частиц SiC и Al_2O_3, обеспечивая тем самым более интенсивное диспергирование структуры в композитах Al–25%B_4C и Al–25%Al_2O_3 (тип 1). Обратная зависимость наблюдается для композитов, изготовленных методом ИПС. Значения микротвердости композитов с добавками мелкодисперсных частиц B_4C и Al_2O_3 (тип 1) ниже, чем значения данного показателя композитов с крупнодисперсными частицами SiC и Al_2O_3 (тип 2). Различия в характере изменения микротвердости композитов, полученных методами ГП и ИПС, в зависимости от типа и дисперсности упрочняющих частиц определяются не только измельчением алюминиевой матрицы при введении частиц, но также особенностями их распределения и достигнутым уровнем пористости материала.

Таблица. Физико-механические и трибологические характеристики изученных материалов

Состав материала	ρ, г/см^3	$\rho_т$, г/см^3	$\rho_{отн}$, %	$П_{общ}$, %	HV 0,05	$I_υ$, мм^3/м
Метод горячего прессования						
Al	2,66	2,70	98,5	1,3	34	2,66
Al+25%B_4C	2,43	2,65	91,7	8,4	45	4,67
Al+25%SiC	2,75	2,83	95,3	2,6	39	0,74
Al+25%Al_2O_3 (тип 1)	2,78	3,01	92,3	7,7	44	3,83
Al+25%Al_2O_3 (тип 2)	2,93	3,01	97,3	2,8	39	1,75
Метод искрового плазменного спекания						
Al	2,68	2,70	99,3	0,7	29	2,42
Al+25%B_4C	2,50	2,65	94,3	5,7	40	5,85
Al+25%SiC	2,73	2,83	97,8	3,5	55	0,45
Al+25%Al_2O_3 (тип 1)	2,57	3,01	85,4	14,6	37	5,25
Al+25%Al_2O_3 (тип 2)	2,90	3,01	96,4	3,6	46	1,21

где ρ – расчетная плотность образца; $\rho_т$ – теоретическая плотность образца; $\rho_{отн.}$ – относительная плотность, %; $П_{общ}$ – общая пористость; HV 0,05 – микротвердость при нагрузке 0,05кгс; $I_υ$ – объемная интенсивность изнашивания, мм^3/м.

Испытания исследуемых материалов на абразивную износостойкость проводили при комнатной температуре на лабораторной трибологической установке по схеме «палец – пластина» на воздухе по закрепленному электрокорунду зернистостью 160 мкм. Анализ результатов (табл.) определения интенсивности изнашивания ($I_υ$) для каждой группы композитов, полученных по различным технологиям, выявил, что минимальная $I_υ$ в обоих случаях характерна для композитов Al–25%SiC (0,74 и 0,45 мм^3/м), в то время как максимальная $I_υ$ зафиксирована для композитов Al–25%B_4C (4,67 и 5,85 мм^3/м). Высокая износостойкость композитов Al–25%SiC по сравнению с Al–25%B_4C обусловлена более прочной межфазной связью SiC/Al и размером частиц наполнителя. При этом наименьшей интенсивностью изнашивания среди всех полученных композитов обладает ИПС–композит Al–25%SiC (0,45 мм^3/м).

Методом сканирующей электронной микроскопии установлено, что поверхности образцов большинства ИПС– и ГП–композитов после трибологических испытаний имеют признаки адгезионного и абразивного износа. Особенностью ИПС–композита Al–25%SiC с минимальной интенсивностью изнашивания является то, что для них механизм абразивного износа преобладает над адгезионным в отличие от композитов аналогичного состава, полученных ГП. ИПС–композит Al–25%B_4C имеет поверхность изнашивания только с

признаками адгезионного износа, а ГП-композит Al–25%B_4C, напротив, имеет доминирующий абразивный механизм износа.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИМАШ УрО РАН по теме № 124020600045-0.

Литература

1. Ж.В. Еремеева, Л.В. Мякишева, В.С. Панов, В.Ю. Лопатин, А.И. Лизунов, А.А. Непапушев, Д.А. Сидоренко, Д.Ю. Мишунин, С.Воротыло. Искровое плазменное спекание и горячее прессование заготовок из карбида бора, полученного различными методами. Евразийский Союз Ученых (ЕСУ), 2018, 8(53) 15–30.
2. С.В. Гладковский, С.В. Петрова, Р.А. Саврай, Т.С. Черкасова. Влияние состава армирующей фазы на структуру и абразивную износостойкость упрочненных частицами B_4C и SiC алюмоматричных композитов. Физическая мезомеханика, 2024, 27(3) 102–115.

ИЗМЕНЕНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ В СПЛАВАХ TINI ПРИ МНОГОКРАТНЫХ МАРТЕНСИТНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЯХ

А.А. Чуракова[1, 2], **Э.И. Исхакова**[1, 2], **Е.В. Воробьев**[1, 2]

[1]*Институт физики молекул и кристаллов – обособленное структурное подразделение Уфимского федерального исследовательского центра РАН, Уфа*
[2]*Уфимский университет науки и технологий, Уфа*
churakovaa_a@mail.ru

Сплавы TiNi выделяются среди материалов с эффектом памяти формы (ЭПФ) наибольшими функциональными характеристиками, повышенной прочностью, пластичностью и хорошим комплексом эксплуатационных свойств, коррозионной стойкостью, биосовместимостью и т.д. Эти обстоятельства, несмотря на сравнительно высокую стоимость сплавов никелида титана, делают их незаменимыми и обусловливают в настоящее время и в будущем их широкое, а в ряде случаев, например, в медицине, исключительное практическое применение в качестве функционального материала нового поколения [1-4]. Известно, что цикл мартенситных превращений (МП) при охлаждении и нагреве приводит к генерации дислокаций в кристаллической решетке. Понимание природы влияния многократных циклов «охлаждения и нагрева» ниже и выше точек мартенситного превращения на структуру и свойства материалов имеет большое значение для сплавов TiNi и изделий из них. В сплавах TiNi при многократных циклах МП происходит увеличение плотности дислокаций, что сопровождается изменением температур мартенситных превращений и повышением предела дислокационной текучести сплавов, и изменением функциональных параметров [5-7]. Эффективным способом повышения прочностных и других физико-механических свойств сплавов TiNi является формирование в них ультрамелкозернистой (УМЗ, размер зерна менее 1 мкм) и нанокристаллической (НК, размер зерна менее 100 нм) структур методами интенсивной пластической деформации [8-13]. Отметим, что величина предела текучести TiNi определяет такие важные характеристики ЭПФ, как реактивное напряжение и ресурс сверхупругости. В связи с тем, что сплавы системы TiNi являются наиболее распространёнными при технологическом применении и обладают наилучшим комплексом свойств среди сплавов с эффектом памяти формы, влияние многократных МП на их структуру и свойства исследовалось на протяжении многих лет. Однако исследования проводились преимущественно на сплавах в крупнозернистом состоянии, либо в состояниях с небольшой степенью деформации, и имеется ограниченное количество работ по изучению процессов накопления дислокаций и изменению свойств при МП сплавов TiNi в УМЗ и НК состояниях.

В качестве материалов исследования были выбраны сплавы $Ti_{50.0}Ni_{50.0}$ (эквиатомного состава), $Ti_{49.3}Ni_{50.7}$, с большим содержанием Ni относительно стехиометрии, выбор застехиометрического сплава объясняется температурами мартенситных превращений близких к комнатным. Для формирования твердого раствора осуществляли закалку сплавов из области гомогенности (от 800°С) в воду. Для формирования УМЗ структуры закаленные образцы сплавов TiNi цилиндрической формы были подвергнуты 8 проходам РКУП по маршруту B_c при 450 °С, угол пересечения каналов (φ) составил 120°. Термоциклирование образцов в различных исходных состояниях осуществлялось следующим образом: образцы последовательно погружали в жидкий азот (-196 ºС), далее нагревали их до температуры 150 °С, что фактически ниже и выше температур $M_к$ прямого и $A_к$ обратного мартенситного превращения. Число термоциклов «нагрев – охлаждение» составляло от 0 до 100 циклов. Толщина образцов в сечении была менее 1 мм для обеспечения их быстрого прогрева и охлаждения. Время выдержки при температуре нагрева и охлаждения равнялось 5 мин. Механические испытания на растяжение малых плоских образцов проводились со скоростью деформации 0,24 мм/мин при комнатной температуре. По результатам испытаний

характеристики прочности (предел фазовой текучести $\sigma_м$, условный предел дислокационной текучести $\sigma_{0,2}$ ($\sigma_т$), временное сопротивление разрыву $\sigma_в$) и пластичности (относительное удлинение после разрушения δ) определяли в соответствии с ГОСТ 1497-84. Разность между пределами дислокационной и фазовой текучести позволяет оценить напряжение $\sigma_р = \sigma_т - \sigma_м$ (оценочное реактивное напряжение). Длина плато на стадии фазовой текучести была принята в качестве оценки обратимой деформации $\varepsilon_{обр}$.

В обоих сплавах в результате многократных фазовых превращений наблюдает рост пределов текучести и прочности и в крупнозернистом, и в ультрамелкозернистом состояниях. УМЗ состояние характеризуется более высокими значениями прочности и предела текучести также благодаря вкладу зернограничного упрочнения. Функциональные характеристики (величина обратимой деформации и реактивное напряжение) повышаются с увеличением числа циклов превращений. В сплаве эквиатомного состава прирост реактивного напряжения в крупнозернистом состоянии ~ 30 %, в ультрамелкозернистом состоянии ~ 36 %, а обратимой деформации возрастает на 0,4 и 0,7 % соответственно. В тоже время исследования на сплаве застехиометрического состава показали значительно меньший прирост функциональных характеристик: рост реактивного напряжения на 4 и 7 % и обратимой деформации на ~ 0,3 %. Таким образом, можно сделать вывод, что сплав эквиатомного состава больше склонен к фазовому наклепу, тем самым в данном сплаве многократные превращения можно рассматривать как способ повышения функциональных характеристик, в случае заникеленного сплава термоциклирование может применяться как метод стабилизации свойств материала.

Литература

1. В.Н. Хачин, В.Г. Пушин, В.В. Кондратьев. Никелид титана: структура и свойства. М.: Наука, 1992. 160 с.
2. V. Brailovski. Shape memory alloys: fundamentals, modeling, applications. Montreal: Ecolede technology esuperieure (ETS) Publ., 2003. 851 p.
3. K. Otsuka, C.M. Wayman. Shape Memory Materials. Cambridge: Cambridge University Press, 1999. 284 p.
4. В.Э. Гюнтер. Медицинские материалы и имплантаты с памятью формы. Томск: ТГУ, 1998. 282 с.
5. S. Miyazaki, Y. Igo, K. Otsuka. Effect of thermal cycling on the transformation temperatures of Ti-Ni alloys. Acta Metall., 1986, 34 (10) 2045–2051.
6. В. Я. Ерофеев, Л. А. Монасевич, В. А. Павская, Ю. И. Паскаль. Фазовый наклеп при мартенситном превращении никелида титана. ФММ, 1982, 53 (5) 963–965.
7. Ю.П. Миронов, П.Г. Ерохин, С.Н. Кульков. Эволюция кристаллической структуры при фазовом наклепе никелида титана. Изв. вузов. Физ., 1997, 2 100–104.
8. Р.З. Валиев, И.В. Александров. М.: Академкнига, 2007. 401 с.
9. R.Z. Valiev, R.K. Islamgaliev, I.V. Alexandrov. Bulk nanostructured materials from severe plastic deformation. Prog. Mater. Sci., 2000, 45 103–189.
10. Е.В. Татьянин, В.Г. Курдюмов, В.Б. Федоров. ФММ, 1986, 62 (1) 133–137.
11. R.Z. Valiev, D.V. Gunderov, V.G. Pushin. Metastable Nanostructured SPD Ti-Ni Alloys with Unique Properties. J. Metastable Nanostruct. Mater., 2005, 24–25 7–12.
12. С.Д. Прокошкин, И.Ю. Хмелевская, С.В. Добаткин, И.Б. Трубицына, Е.В. Татьянин, В.В. Столяров, Е.А. Прокофьев. Эволюция структуры при интенсивной пластической деформации сплавов с памятью формы на основе TiNi. ФММ, 2004, 97 (6) 84–90.
13. R.Z. Valiev, D.V. Gunderov, A.V. Lukyanov, V.G. Pushin. Mechanical behavior of nanocrystalline TiNi alloy produced by severe plastic deformation. J. Mater. Sci., 2012, 47 (22) 7848–7853.

ОДНОСТАДИЙНЫЙ ПЛАЗМОХИМИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ ГИДРИРОВАННОГО ГРАФЕНА: ЭКСПЕРИМЕНТ И МОДЕЛИРОВАНИЕ

М.Б. Шавелкина[1], Е.А. Рожнова[2], К.А. Крылова[2, 3], Ю.А. Баймова[2, 4], П.П. Иванов[1]

[1]Объединённый институт высоких температур РАН, Москва
[2]Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
[3]Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа
[4]Уфимский университет науки и технологий, Уфа
mshavelkina@gmail.com

Экспериментально и теоретически показана возможность формирования стабильных водородных доменов в графене при одностадийном пиролизе метана в аргоновой плазме. Синтез графена проводили при непрерывном повышении давления в интервале 350–710 Торр в плазмохимическом реакторе на основе электродугового плазмотрона. Термодинамический анализ показал, что после конденсации углерода в газовой фазе поддерживается высокая концентрация молекулярного водорода (15–25 об.%) и водородсодержащих радикалов, что создаёт условия для адсорбции водорода на поверхности графеновых слоёв и его интеркаляции в межслоевое пространство. Методами электронной микроскопии, Раман-спектроскопии, РФА и ТГА-МС обнаружены и охарактеризованы ромбовидные водородные домены с характерным углом ~120°, локализованные в межслоевых областях графена. Методом молекулярной динамики выявлен механизм стабилизации доменов через адгезию краёв графеновых слоёв («механический замок»), предотвращающий десорбцию водорода. Установлено, что эффективность удержания водорода критически зависит от числа слоёв: трёхслойные структуры демонстрируют минимальную десорбцию (<5%), тогда как девятислойные системы теряют 30–40% водорода. В структурах с более чем десятью слоями формирование доменов затруднено из-за неполной адгезии слоёв и повышенной жёсткости. Результаты демонстрируют принципиальную возможность создания стабильных водородных наноконтейнеров в процессе роста графена, открывая путь к разработке эффективных материалов для хранения и транспортировки водорода [1–3]. Масштабируемость плазмохимического синтеза позволяет организовать промышленное производство гидрированных углеродных материалов.

Литература

1. D.C. Elias, R.R. Nair, T.M.G. Mohiuddin, S.V. Morozov, P. Blake, M.P. Halsall, A.C. Ferrari, D.W. Boukhvalov, M.I. Katsnelson, A.K. Geim. Control of graphene's properties by reversible hydrogenation: Evidence for graphane. Science, 2009, 323, 610-613.
2. V. Tozzini, V. Pellegrini. Prospects for hydrogen storage in graphene. Phys. Chem. Chem. Phys., 2013, 15(1), 25-35.
3. L. Alharthi, K. Hazazi, A. Alanazi, A. Bokhari. Hydrogen storage in carbon materials: Areview of mechanisms, performance, and optimization strategies. Renew. Sustain. Energy Rev., 2026, 231, 116751.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ЭФФЕКТИВНОСТИ ТЕПЛОВОГО, ДЕФОРМАЦИОННОГО И УЛЬТРАЗВУКОВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА ТИТАНОВЫХ СПЛАВОВ ОТ4-1 И ВТ6 ПРИ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОМ АДДИТИВНОМ ПРОИЗВОДСТВЕ

Шамарин Н.Н., Филиппов А.В.

Институт физики прочности и материаловедения им. В.Е. Панина Сибирского отделения Российской академии наук, Томск
shnn@ispms.ru

Проволочное электронно-лучевое аддитивное производство является высокопроизводительным методом создания крупногабаритных изделий из титановых сплавов, однако его ключевым недостатком остаётся формирование грубой столбчатой макроструктуры и текстуры, что приводит к анизотропии механических свойств и нестабильной коррозионной стойкости. На основе цикла экспериментальных работ проведено систематическое исследование влияния трёх технологических факторов (тепловложения, ударно-механической обработки и ультразвукового воздействия) на структурно-фазовое состояние, комплекс механических характеристик и коррозионную стойкость для двух титановых сплавов: псевдо-α сплава ОТ4-1 и двухфазного ВТ6.

Образцы в виде тонких стенок выращивали на установке электронно-лучевого аддитивного производства в ИФПМ СО РАН при ускоряющем напряжении 30 кВ с использованием проволоки. В первой серии экспериментов варьировали погонную энергию. Во второй серии, при фиксированном тепловложении применяли ударно-механическую обработку (УМО) с энергией удара 3 Дж и частотой 50 Гц после печати каждых 4, 8 или 16 слоёв. В третьей серии, через подложку подводили непрерывное ультразвуковое воздействие. Для всех образцов проведены оптическая и конфокальная микроскопия, рентгенофазовый анализ, испытания на растяжение при комнатной температуре, измерение микротвёрдости и потенциодинамические испытания на коррозионную стойкость в 3,5 % растворе NaCl.

Установлено, что увеличение тепловложения приводит к утолщению стенок (с 3–5 до 7–8 мм) и уменьшению их высоты (с 40 до 30 мм) за счёт растекания расплава. Во всех режимах без внешних воздействий наблюдается общая закономерность: толщина пластин α-фазы и размер ламеллярных колоний возрастают от нижних слоёв к верхним вследствие замедления теплоотвода. Фазовый состав остаётся двухфазным независимо от тепловложения. Для сплава Ti–6Al–4V с уменьшением тепловложения предел прочности в горизонтальном направлении возрастает с 832 до 982 МПа, а пластичность снижается с 16,8 % до 13,7 %. Для сплава ОТ4-1 аналогичная тенденция: при высоком тепловложении $\sigma_в$ = 669 МПа, δ = 18,2 %, а при низком – $\sigma_в$ = 635 МПа, δ = 16 %. Микротвёрдость обоих сплавов закономерно снижается с ростом тепловложения. Наилучшая коррозионная стойкость для сплавов ОТ4-1 и ВТ6 достигается при их печати с низким тепловложением.

Применение послойной ударно-механической обработки (УМО) кардинально меняет макроструктуру обоих сплавов: обработка после каждых 4 или 8 слоёв полностью разрушает столбчатую текстуру, формируя сильно фрагментированное зерно по всей высоте стенки. Для сплава Ti–6Al–4V УМО после каждых 4 слоёв повышает предел прочности с 807 МПа (без обработки) до 950 МПа (прирост 17,7 %), а пластичность снижается с 19,7 % до 11,6 %. При обработке каждых 8 слоёв $\sigma_в$ = 893 МПа, δ = 13 %, а при 16 слоях – $\sigma_в$ = 893 МПа, δ = 15 %. Для сплава ОТ4-1 наблюдается аналогичная корреляция: с увеличением интервала между обработками прочность монотонно снижается (с 684 до 650 МПа), а пластичность растёт (с 7,2 % до 13,7 %). Микротвёрдость для Ti–6Al–4V возрастает с 3,4 ГПа (без УМО) до 3,87 ГПа (обработка 4 слоёв), для ОТ4-1 – с 3,08 до 3,22 ГПа. На основе анализа распределения

твёрдости для обоих сплавов чётко видны локальные пики, соответствующие деформированным слоям.

Прямое подведение ультразвукового воздействия (УЗВ) через подложку оказало негативное воздействие на оба сплава. Для ОТ4-1 УЗВ привело к огрублению α-ламелей (до 3,2–5,8 мкм), появлению пор, межкристаллитных трещин и несплошностей. Прочность в горизонтальном направлении снизилась на 78 МПа, пластичность упала на 12 %; микротвёрдость, напротив, достигла максимума (3,25 ГПа) за счёт остаточных напряжений, а скорость коррозии увеличилась на порядок. Для сплава Ti–6Al–4V УЗВ измельчило α-пластины в верхних и средних слоях почти вдвое, но не изменило их в нижних из-за циклического отжига, что привело к резкой слоистой неоднородности и градиенту микротвёрдости (4–4,5 ГПа). Прочность снизилась до 815–879 МПа, пластичность упала до 5,4–9,2 %, а скорость коррозии оказалась в 5,6 раза выше, чем у лучшего образца без УЗВ.

На основе выполненных исследований можно предложить следующие технологические рекомендации для электронно-лучевого аддитивного производства титановых сплавов ОТ4-1 и ВТ6. Прежде всего, выбор тепловложения должен определяться требуемым сочетанием прочности и пластичности: для достижения максимальной прочности следует применять низкое тепловложение, однако при этом необходимо предусматривать механическую обработку из-за нестабильности геометрии стенок; если же на первый план выходит пластичность и вязкость разрушения, предпочтительно высокое тепловложение, особенно для деталей, работающих при циклических нагрузках.

Наиболее эффективным методом in-situ модификации структуры является послойная ударно-механическая обработка. Оптимальным интервалом между обработками является 8 последовательно напечатанных слоёв: он обеспечивает наилучшее сочетание прочности, пластичности, микротвёрдости и коррозионной стойкости. При интервале в 4 слоя достигается максимальное упрочнение, но резко снижаются пластичность и коррозионная стойкость, а при интервале в 16 слоёв, напротив, возрастает пластичность за счёт умеренного падения прочности. Ударно-механическая обработка может быть рекомендована для получения изделий сложной формы, где важна изотропность свойств. Использованный в работе контактный подвод ультразвука через подложку требуется модифицировать, поскольку он вызывает дефектообразование, огрубление структуры и ухудшение всех механических и коррозионных характеристик.

Проведённые исследования на двух титановых сплавах показывают, что среди изученных методов управления свойствами напечатанных тонких стенок наиболее эффективным и контролируемым является послойная ударно-механическая обработка, позволяющая тонко настраивать баланс прочности и пластичности за счёт выбора интервала обработки (оптимальный для обоих сплавов – 8 слоёв). Варьирование тепловложения даёт предсказуемые изменения, но не устраняет нежелательную текстуру. Ультразвуковое воздействие в использованном режиме (контактный ввод через подложку) оказалось неэффективным для обоих сплавов из-за формирования дефектов и гетерогенизации структуры, что приводит к деградации механических и коррозионных свойств. Полученные результаты указывают на необходимость детальной оптимизации параметров внешних воздействий (частота, мощность, способ ввода) для реализации потенциальных преимуществ ультразвука при электронно-лучевом аддитивном производстве.

В качестве перспективных направлений дальнейших исследований следует выделить оптимизацию параметров ультразвука (снижение мощности, изменение частоты, переход к бесконтактной подаче) для устранения индуцированной дефектности, изучение комбинированных режимов УМО с последующей термической обработкой для тонкой настройки свойств, разработку численных моделей, прогнозирующих структурные изменения, а также расширение экспериментов на другие титановые сплавы и крупногабаритные изделия с оценкой экономической эффективности. Представленные рекомендации позволяют целенаправленно выбирать технологические режимы печати в зависимости от эксплуатационных требований к готовым изделиям.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-29-00959, https://rscf.ru/project/25-29-00959/

МИКРОСТРУКТУРА И МИКРОТВЕРДОСТЬ ТВЕРДОФАЗНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ИЗ РАЗНОИМЕННЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ ЭК61 И ЭП741НП

М.П . Шапкин, А.А. Тагирова, Р.Р Габбасов, Е.М. Степухов, Э.В. Галиева, В.А. Валитов

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
michaelshapkinza9897@gmail.com

В настоящее время, актуальными являются исследования, посвященные созданию биметаллических соединений из жаропрочных никелевых сплавов. Особый интерес представляют биметаллические конструкции, сочетающие порошковые и деформируемые сплавы [1, 2]. В данной работе исследовано влияние термической обработки на микроструктуру и микротвердость твердофазного соединения между гранулируемым сплавом ЭП741НП (упрочняемым γ′-фазой, Ni_3Al) и деформируемым сплавом ЭК61 (упрочняемым γ″-фазой) Ni_3Nb) методом сварки давлением с использованием сверхпластической деформации.

Сварку давлением проводили при температуре 925 °С на установке RMS-100. Термическую обработку проводили в электропечи ATS, которая включала закалку с температуры 980°С и последующее старение при 730°С.

В исходном состоянии сплав ЭК61 имеет ультрамелкозернистую (УМЗ) структуру смешанного типа, которая представляет собой зерна матричной γ-фазы и δ-фазы (термически стабильная модификация γ″-фазы) размером менее 1 мкм, а также относительно крупные частицы δ-фазы размером 1,5-2 мкм. Объёмная доля δ-фазы составляет 24%. Сплав ЭП741НП имеет мелкозернистую (МЗ) структуру типа миродупекс, которая представляет собой зерна матричной γ-фазы размером 5-7 мкм и некогерентные частицы γ′-фазы размером 2-3 мкм, при этом внутри матричных зерен присутствуют дисперсные когерентные частицы γ′-фазы.

По результатам исследований твердофазных соединений ЭК61//ЭП741НП показано, что после сварки давлением в сплаве ЭК61 произошла трансформация УМЗ→МЗ структуру, размер матричных зерен составил 3,2±0,2 мкм, объемная доля δ-фазы вследствие частичного растворения снизилась до 9,8%. Структура сплава ЭП741НП после сварки сохранилась мелкозернистой. В результате воздействия температуры сварки произошла взаимная диффузия легирующих элементов, например, диффузия Al (из ЭП741НП) и Nb (из ЭК61), а также сформировалась диффузионная зона шириной 8 мкм. Термическая обработка способствовала ее расширению до 10 мкм. В зоне твердофазного соединения как после сварки, так и последующей термической обработки никаких хрупких частиц обнаружено не было, что подтверждается и результатами измерений микротвердости: пиковых значений не выявлено; наблюдается монотонное увеличение значения микротвердости при переходе от сплава ЭК61 к сплаву ЭП741НП.

Литература

1. E.V. Galieva, A.A. Tagirova, R.R. Gabbasov, V.A. Valitov, Effect of heat treatment on the microstructure and properties of solid-state joints of dissimilar Ni-based superalloys. Lett. Mater., 2025, 15 (4) 376-382
2. R.R. Gabbasov, A.A. Tagirova, E.V. Galieva, V.A. Valitov Formation of solid-state joints of dissimilar alloys based on Ni and Ni_3Al. Lett. Mater., 2024, 14 (4) 475–481.

УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОЕ СОСТОЯНИЕ И ДЕФОРМАЦИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ БИОИНЕРТНЫХ ТИТАНОВЫХ И РЕЗОРБИРУЕМЫХ МАГНИЕВЫХ СПЛАВОВ

Ю.П. Шаркеев[1, 2], А.Ю. Ерошенко[1], Е.В. Легостаева[1], Н.А. Лугинин[1]

[1]*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*
[2]*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск*
sharkeev@ispms.ru

Биомедицинское материаловедение является развивающемся направлением науки о материалах. Особое место занимают материалы для замещения костной ткани организма. В настоящее любой элемент костной системы живого человека может быть заменен искусственным имплантатом или конструкцией. В качестве материалов для имплантатов применяют металлические, керамические и полимерные материалы. Наиболее широко применяются металлические материалы. Среди них можно выделить два типа сплавов, это биоинертные титановые сплавы и резорбируемые магниевые сплавы. Два типа сплавов имеют различающиеся физико-химические свойства и соответственно разные применения.

Металлы и сплавы должны иметь минимально необходимые механические свойства для медицинских применений (пределы прочности и текучести, твердость, предельная пластичность, циклическая долговечность, модуль упругости и др.). Повышение уровня механических характеристик сплавов осуществляется за счет формирования ультрамелкозернистого (УМЗ) и/или мелкозернистого (МЗ) состояний в результате применения термодеформационных обработок, включая методы интенсивной пластической деформации (ИПД). Все это определяет актуальность темы, направленной на решение задач, связанных с повышением уровня механических характеристик и с исследованием влияния структурного состояния на механические и коррозионные свойства сплавов.

В настоящей работе обобщены результаты комплексного исследования микроструктурного состояния, физико-механических характеристик, процессов диссипации и накопления энергии в β-титановых и магниевых сплавах в крупнокристаллическом и УМЗ (КК+УМЗ – бимодальная структура) состояниях при одноосном растяжении растяжением. В качестве материалов исследования были выбраны технически чистый титан марки ВТ1-0, низкомодульные β-титановые биоинертные сплавы: Ti-45Nb, Ti-42Nb-7Zr, Ti-39.5Nb-5Zr Ti-39.5Nb-5Zr-2Ta-2Sn, и резорбируемые магниевые сплавы: Mg-0,8Ca, Mg-2,9Y-1,3Nd и Mg-1,0Zn-0,1Zr-0,1Ce.

Показано, что применение методов ИПД для образцов указанных сплавах приводят к существенному измельчению зеренной-субзеренной структуры вплоть до УМЗ состояния и значительному росту прочностных свойств при сохранении исходного модуля упругости. Для β-сплавов: Ti-45Nb, Ti-42Nb-7Zr, Ti-39.5Nb-5Zr, Ti-39.5Nb-5Zr-2Ta-2Sn, применение двухэтапного метода ИПД, включающего свободное *abc*-прессование или в пресс-форме и последующую многоходовую прокатку в ручьевых валках с последующим дорекристаллизационным отжигом. Данный метод способствует формированию УМЗ структуры со средним размером структурных элементов (зерна, субзерна, субзерна) основной β-фазы, лежащим в интервале 0,2-0,3 мкм для разных сплавов. Для сплава Mg-Zn-Zr-Ce ИПД приводит также к формированию УМЗ структуры, но со средним размером α-зерен 1 мкм. Реализация метода экструзии для магниевых сплавов Mg-2,9Y-1,3Nd и Mg-0,8Ca формирует бимодальную КК+УМЗ структуру, где доля УМЗ структуры (с размерами зерен в пределах 0,5-1 мкм) составляет до 50% от объёма. Ниже в таблице приведены полученные механические свойства указанные сплавов в различных структурных состояниях.

Повышение механических свойств титановых сплавов связано с субструктурным и дисперсионным упрочнением за счёт присутствия в β-матрице нанодисперсных выделений α- и-ω-фаз, а в магниевых сплавах Mg-2,9Y-1,3Nd и Mg-0,8Ca – интерметаллиды $Mg_{24}Y_5$, β-,

β′-, и β1-фаза и интерметаллид Mg_2Ca соответственно. В случае сплава Mg-1,0Zn-0,1Zr-0,1Ce наибольший эффект в упрочнение вносят зернограничный и дислокационный вклады, фазовой состав при этом не изменяется.

Таблица. Механические характеристики титановых и магниевых сплавов

Сплав / состояние	Предел упругости σ_{02}, МПа	Предел прочности $\sigma_в$, МПа	Пластическая деформация ε, %	Микро-твердость Hμ, МПа	Модуль упругости E, ГПа
Ti-45Nb / КК	350	700	14,5	2300	50
Ti-45Nb / УМЗ	420	1150	6,5	3100	60
Ti-42Nb-7Zr / КК	350	550	8,7	1700	42
Ti-42Nb-7Zr / УМЗ	480	1100	4,6	2800	36
Ti-39.5Nb-5Zr / КК	420	580	18,0	2090	65
Ti-39.5Nb-5Zr / УМЗ	460	1100	12,0	2670	-
Ti-39.5Nb-5Zr-2Ta-2Sn / КК	430	510	13,0	2020	63
Ti-39.5Nb-5Zr-2Ta-2Sn / УМЗ	470	780	12,0	2400	65
Mg-0,8Ca / КК	70	110	3,3	560	30
Mg-0,8Ca / КК+УМЗ	180	225	21,0	650	30
Mg-2,9Y-1,3Nd / КК	150	230	12,0	860	33
Mg-2,9Y-1,3Nd / КК+УМЗ	220	340	21,0	1210	35
Mg-1,0Zn-0,1Zr-0,1Ce / КК	90	190	13,0	605	35
Mg-1,0Zn-0,1Zr-0,1Ce / УМЗ	250	270	3,0	750	35

Интенсивная пластическая деформация приводит к существенному измельчению основной матричной фазы во всех исследованных сплавах. В сплаве Ti-45Nb средний размер зерен β-фазы уменьшается с 45 до 0,2 мкм, в сплаве Ti-39,5Nb-5Zr – с 20 до 0,2 мкм, а в сплаве Ti-39,5Nb-5Zr-2Ta-2Sn–с 45 до 0,3 мкм. При этом в УМЗ-состоянии титановых сплавов сохраняется многофазная структура, включающая β-, α- и ω-фазы либо β- и ω-фазы в зависимости от состава сплава. Для магниевых сплавов также наблюдается значительное измельчение зерен α-Mg: в сплаве Mg-0,8Ca исходный размер зерна около 90 мкм после обратной экструзии сменяется бимодальной КК+УМЗ-структурой с характерными размерами зерен около 10 и 1 мкм, а в сплаве Mg-2,9Y-1,3Nd размер зерен уменьшается с 40 мкм до формирования бимодальной структуры с модами около 14 и 1 мкм. В сплаве Mg-1,0Zn-0,1Zr-0,1Ce комбинированная ИПД обеспечивает уменьшение среднего размера зерен α-Mg с 25 до 1 мкм и формирование более однородного УМЗ-состояния.

Анализ процессов накопления и диссипации энергии при деформировании растяжением и при разрушении β-титановых и магниевых сплавов позволил установить, что субструктурное упрочнение при ИПД и наличие упрочняющих частиц в значительной степени определяет развитие деформации и разрушения. Выполненныее комплексные исседования демонстрируют перспекивное использование методов ИПД с целью целенаправленного управления структурой и физико-механическими свойствами β-титановых биоинертных и биорезорбируемых магниевых сплавов. Рассматриваются вопросы, связанные с практическим применением данных сплавов для медицины.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема FWRW-2026-0005. Исследования выполнены на оборудовании ЦКП «НАНОТЕХ» ИФПМ СО РАН», ЦКП "Структура, механические и физические свойства материалов" НГТУ и ТМЦКП при ТРЦКП ТУ.

ПОСТРОЕНИЕ КАРТ ГОРЯЧЕЙ ОБРАБОТКИ ДЛЯ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО RE-СОДЕРЖАЩЕГО НИКЕЛЕВОГО СПЛАВА

Р.В. Шахов, Р.И. Зайнуллин, А.А Ганеев, Ш.Х. Мухтаров, В.М. Имаев

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
shakhov@imsp.ru

Для разработки перспективных газотурбинных двигателей (ГТД) требуется создание высоколегированных жаропрочных поликристаллических никелевых сплавов с повышенными механическими свойствами. Неразрывно с этим необходимо определять условия их деформационной обработки. Для недавно разработанного литого никелевого сплава СДЖС-15, содержащего рений также необходимо определить оптимальные условия деформации с формированием однородной мелкозернистой структуры. Химический состав сплава в вес. % был определен как Ni-28(Cr,Co)-12.5(Al,Ti,Nb,Ta)-9(Mo,W,Re)-0.17(C,La,Y,Ce,B), температура полного растворения γ′-фазы была 1220±5°C. В работах [1-3] для этого сплава ранее были разработаны режимы гомогенизационного отжига, определены условия для горячей и изотермической деформации, прохождения динамической и постдинамической рекристаллизации на основе структурных исследований при сжатии образцов. Такие сплавы имеют узкий диапазон рабочих температур и значительные сложности при обработке. Образцы крупнозернистого сплава после гомогенизационного отжига с медленным охлаждением были подвергнуты сжатию в изотермических условиях в широком диапазоне температур и начальных скоростей деформации до истинной степени 1,3. Рассматриваемые в результате сжатия кривые напряжение-деформация охватывают явления динамической рекристаллизации. По построенным кривым истинные напряжения – истинные деформации были рассчитаны коэффициент скоростной чувствительности m, и эффективность диссипации энергии при структурных превращениях во время пластической деформации η. Карты горячей обработки сплава были построены на основе динамической модели материала. Исследовано влияние деформационных условий на рекристаллизационное поведение. Повышенные значения коэффициента m явились наиболее благоприятными с точки зрения энергозатрат η на структурные изменения, которые обеспечили внесение в материал значительной энергии пластической деформации, что способствовало микроструктурным превращениям. Определены оптимальные температурно-скоростные параметры для изотермической деформации в сочетании с картами горячей обработки и результатами исследования микроструктуры.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Госзадания ИПСМ РАН (№ 124022900106-9). Экспериментальные исследования были выполнены на базе Центра коллективного пользования научным оборудованием ИПСМ РАН.

Литература

1. S. Mukhtarov, R. Shakhov, A. Ganeev, V. Imayev. Effect of direct ageing on the microstructure, tensile properties and fracture behavior of a Re-bearing polycrystalline nickel-based superalloy. Mater. Sci. Technol., 2026, 42(9) 940-954.
2. V. Imayev, S. Mukhtarov, K. Mukhtarova, A. Ganeev, R. Shakhov, N. Parkhimovich, A. Logunov, Influence of Forging and Heat Treatment on the Microstructure and Mechanical Properties of a Heavily Alloyed Ingot-Metallurgy Nickel-Based Superalloy. Metals, 2020, 10, 1606.
3. А.В. Логунов, Ю.Н. Шмотин, Д.В. Данилов, Ш.Х. Мухтаров, А.М. Михайлов. Разработка и исследование нового жаропрочного никелевого сплава для дисков газотурбинных двигателей и установок. Двигатель, 2017, 112(4) 10-12.

ВЛИЯНИЕ ИСХОДНОЙ СТРУКТУРЫ ПЛАСТИН МЕДИ НА КАЧЕСТВО ТОЧЕЧНЫХ СОЕДИНЕНИЙ, ПОЛУЧЕННЫХ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ СВАРКОЙ

Э.Р. Шаяхметова, М.А. Мурзинова, А.А. Назаров

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
elvinar@imsp.ru

Ультразвуковая сварка (УЗС) металлов предназначена для получения твердофазных соединений между тонкими металлическими полуфабрикатами. Соединение формируется за счет энергии сдвиговых колебаний ультразвуковой частоты при одновременном воздействии сжимающей силы. Качество полученных сварных соединений зависит как от параметров процесса УЗС, так и от механических и теплофизических свойств соединяемых материалов. Нагрев (обычно до $0{,}5T_{пл}$) и высокоскоростная знакопеременная сдвиговая деформация, сосредоточенная вблизи поверхностей контакта, обеспечивают развитие диффузии и динамической рекристаллизации, которая как правило, приводит к формированию в зоне соединения ультрамелкозернистой структуры. Однако соединения высокого качества, с наименьшим количеством несплошностей и высокими механическими свойствами образуются, если в зоне соединения происходит рост зерен. Надежно установлено, что движущая сила миграции границ выше в металлах с ультрамелкозернистой структурой, полученной методами интенсивной пластической деформации, что может способствовать формированию твердофазного соединения и повышению его механических свойств.

Чтобы понять, какую роль оказывает исходная структура материалов на прочность, микроструктуру и линейную плотность сварных соединений, пластины меди с исходной крупнозернистой (КЗ) и ультрамелкозернистой (УМЗ) структурой подвергали УЗС с амплитудой колебаний сварочного наконечника 22-26 мкм под действием нормального давления 62 МПа при энергиях от 250 до 1500 Дж. Пластины с КЗ структурой вырезали из промышленного листа толщиной 0,8 мм. Пластины толщиной 0,8 мм с УМЗ структурой вырезали из прутков меди, подвергнутых равноканальному угловому прессованию.

Результаты эксперимента показали, что при увеличении энергии сварки от 250 до 500-750 Дж прочность сварных образцов возрастает до наибольших значений независимо от исходной структуры пластин. При этом максимальные усилия разрушения при испытаниях на срез при растяжении соединений пластин с исходной УМЗ структурой были в 1,5 раза выше, чем после сварки КЗ пластин. После УЗС с бóльшими энергиями разница прочностных характеристик образцов, сваренных из заготовок с разной исходной структурой, быстро уменьшалась и исчезала при энергии сварки 1500 Дж. Несмотря на значительную разницу свойств, после УЗС с энергиями 250-750 Дж, существенных отличий ни в средней плотности соединений, ни в структуре вблизи поверхности контакта пластин не обнаружено. Наиболее значимые структурные различия наблюдались в объемах сваренных пластин, на расстоянии 100-200 мкм от зоны соединения. В пластинах с исходной КЗ структурой при УЗС во всем диапазоне энергий наблюдались изменения субструктуры, тогда как в пластинах с исходной УМЗ структурой увеличение энергии УЗС приводило к быстрому росту зерен, и после УЗС с энергией 750 Дж средние размеры зерен в объемах пластин становились близкими. Разупрочнение УМЗ пластин при УЗС сопровождалось быстрым уменьшением их толщины под зубцами сварочного наконечника. Из анализа полученных данных следует, что прочность сварных образцов существенно зависит не только от сплошности сварного соединения, но и от свойств материала околошовной зоны и геометрических характеристик сварных образцов в сварной точке.

Исследование выполнено в рамках государственного задания ИПСМ РАН (регистрационный номер 124022900006-2). Микроструктурные исследования проводились на базе ЦКП ИПСМ РАН "Структурные и физико-механические исследования материалов".

МНОГОУРОВНЕВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГОРЯЧЕЙ И СВЕРХПЛАСТИЧЕСКОЙ ФОРМОВКИ ИЗДЕЛИЙ ИЗ АЛЮМИНИЕВЫХ СПЛАВОВ

А.И. Швейкин, Э.Р. Шарифуллина, А.А. Вшивкова, В.Э. Вильдеман, С.А. Оглезнева

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь
shveykin@pstu.ru

Эксплуатационные характеристики изделий определяются состоянием внутренней структуры материала. Для создания передовых технологий формовки из металлов и сплавов требуются математические модели, способные адекватно описывать происходящие процессы структурных изменений. Поэтому сегодня в механике деформируемого твердого тела одним из ключевых направлений стало развитие многоуровневых конститутивных моделей [1–4]. Данная междисциплинарная область, находящаяся на стыке материаловедения, нелинейных механики и физики деформируемого твердого тела (мезомеханики [1, 2]), отличается высокой сложностью. В связи с этим сохраняется острая потребность в совершенствовании математического аппарата: существующие модели необходимо дополнять физически достоверным описанием механизмов, которые управляют поведением металлов при сложных сценариях воздействий.

Использование режима сверхпластичности при повышенных температурах является перспективным направлением развития технологий изготовления изделий сложной формы. В качестве основных преимуществ данного вида обработки выделяют следующие [5–8]: снижение ресурсоемкости изготовления; возможность получения изделий (в том числе крупногабаритных) разнообразной сложной формы со сниженным весом без сварных/ клепаных соединений (или с их уменьшенным количеством); получение гладкой поверхности изделия с минимальным отклонением от заданной геометрии – с предотвращением разнотолщинности и с высокоточным заполнением штампов; улучшенные физико-механические характеристики получаемого изделия, в частности, хорошие показатели прочности и пластичности при изготовлении и в условиях эксплуатации, а также изотропия механических свойств на макромасштабном уровне. Это обусловливает широкое применение сверхпластической штамповки и формовки в промышленном производстве, в том числе в таких важнейших отраслях, как авиа- и ракетостроение [5, 6]. В последнее время все более широкое применение находят и комплексные технологии, совмещающие сверхпластическую формовку и сварку, позволяющие получать многослойные пустотелые конструкции для авиастроения с повышенным качеством сварных соединений [5, 6].

Предлагается модификация ранее разработанных моделей алюминиевых сплавов [9,10], включающая описание сверхпластического деформирования и переходных режимов, путем детального и совместного учета ряда важных взаимовлияющих механизмов – зернограничного проскальзывания, внутризеренного дислокационного скольжения, динамической рекристаллизации. В модели учитываются границы между кристаллитами и их взаиморасположение. Соотношения сформулированы в скоростной форме, осуществляется переход от скоростей смещений по границам и по плоскостям скольжений внутри зерен к соответствующим деформационным характеристикам – скоростям сдвига, что позволяет аддитивно учитывать вклады основных механизмов в скорость неупругих деформаций. Взаимовлияние механизмов и аккомодационных процессов отражено в соотношениях для скоростей изменения критических напряжений (законах упрочнения) внутризеренных и зернограничных сдвигов. Осуществлено обобщение модели на случаи повышенных температур и произвольного изменения температурно-скоростных условий [11].

Соотношения модели были дополнены учетом влияния легирующих добавок. Для этого были проанализированы закономерности поведения ряда алюминиевых сплавов при сверхпластическом деформировании в зависимости от их структуры [12] и установлено, что

в них могут содержаться различные типы частиц, оказывающих значимое влияние на обозначенные выше механизмы. В частности, они могут приводить не только к повышению прочности, но и стабилизации структуры материала в процессе сверхпластического деформирования за счет торможения роста зерен – частицы «закрепляют» границы (пиннинг-эффект). Наличие частиц учтено в соотношениях, описывающих скорости изменения критических напряжений внутризеренных и зернограничных сдвигов, динамическую рекристаллизацию, ротации [13].

Были проведены экспериментальные механические и материаловедческие исследования, а также моделирование сверхпластического деформирования образцов из современного российского промышленного алюминиевого сплава 1565ч при различных условиях; установлено, что модель позволяет описать наблюдаемые в экспериментах закономерности при разных сценариях деформирования [13].

Расчетные модули для разработанной многоуровневой конститутивной модели встроены в пакет, реализующий комплекс созданных коллективом многоуровневых конститутивных моделей. Он интегрируется с решателями краевых задач МДТТ методом конечных элементов, что позволяет проводить углубленное моделирование технологических процессов формовки изделий.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 25-19-00747).

Литература

1. В.Е. Панин, В.Е. Егорушкин, П.В. Макаров и др. Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов: В 2-х т., Т.1. Новосибирск: Наука. Сибирская издат. фирма РАН. 1995. 298 с.
2. В.Е. Панин, П.В. Макаров, С.Г. Псахье и др. Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов: В 2-х т., Т.2. Новосибирск: Наука. Сибирская издат. фирма РАН. 1995. 320 с.
3. П.В. Трусов, А.И. Швейкин. Многоуровневые модели моно- и поликристаллических материалов: теория, алгоритмы, примеры применения. Новосибирск: Изд-во СО РАН. 2019. 605 с.
4. П.В. Трусов, А.И. Швейкин, Н.С. Кондратьев, А.Ю. Янц. Многоуровневые модели в физической мезомеханике металлов и сплавов: результаты и перспективы. Физическая мезомеханика, 2020, 6 33-62.
5. И.Н. Фридляндер. Современные алюминиевые, магниевые сплавы и композиционные материалы на их основе. Металловедение и термическая обработка металлов, 2002, 7 24-29.
6. Р.Р. Мулюков, Р.М. Имаев, А.А. Назаров и др. Сверхпластичность ультрамелкозернистых сплавов: эксперимент, теория, технологии. М.: Наука. 2014. 284 с.
7. A.A. Mogucheva, R.O. Kaibyshev. Ultrahigh superplastic elongations in an aluminum–lithium alloy. Doklady Physics, 2008, 8 431-433.
8. L. Bhatta, A. Pesin, A. Zhilyaev, P. Tandon, C. Kong, H. Yu. Recent development of superplasticity in aluminum alloys: a review. Metals, 2020, 1 (26p).
9. П.В. Трусов, Э.Р. Шарифуллина, А.И. Швейкин. Многоуровневая модель для описания пластического и сверхпластического деформирования поликристаллических материалов. Физическая мезомеханика. 2019, 2 5-23.
10. A.I. Shveykin, P.V. Trusov, E.R. Sharifullina. Statistical crystal plasticity model advanced for grain boundary sliding description. Crystals, 2020, 9 (18 p).
11. А.И. Швейкин, А.А. Вшивкова, П.В. Трусов. Двухуровневая конститутивная модель металла с комплексным учетом изменяющихся температурно-скоростных условий. Физическая мезомеханика, 2024, 2 50-68.
12. Э.Р. Шарифуллина, А.И. Швейкин, П.В. Трусов. Влияние легирующих добавок на структуру Al-Li сплавов и механизмы деформирования в условиях сверхпластичности (аналитический обзор). Вестник ПНИПУ. Механика, 2023, 6 135-157.
13. Э.Р. Шарифуллина, А.И. Швейкин, П.В. Трусов, А.А. Вшивкова. Многоуровневая модель с учетом влияния легирующих добавок для описания сверхпластичности алюминиевых сплавов. Физическая мезомеханика, 2026, 1 173-189.

ВЫЯВЛЕНИЕ МОРФОЛОГИИ ПЕРЛИТА, ФОРМИРУЮЩЕГОСЯ В ПРОЦЕССЕ ИЗГОТОВЛЕНИЯ РЕЛЬСОВ ИЗ СТАЛИ ЗАЭВТЕКТОИДНОГО СОСТАВА

О.В. Шугаев[1], Д.А. Романов[1], В.Е. Громов[1], Е.С. Денисенко[2]

[1]Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк
[2]Филиал Кузбасского государственного технического университета имени Т.Ф. Горбачева в г. Прокопьевске, Прокопьевск
o_shugaev@mail.ru

Во многих случаях эксплуатация железных дорог осуществляется в суровых условиях: высокая нагрузка и интенсивность движения, низкие температуры, сравнительно малый радиус поворота (большая кривизна пути). Эти условия характерны для Забайкальской и Восточно-Сибирской железных дорог. Такие суровые условия эксплуатации приводят к ускорению усталости и износа материала рельса со временем эксплуатации, что, в свою очередь, влечет за собой значительное сокращение срока службы железнодорожных путей. Одним из направлений борьбы с контактной усталостью и износом металла рельсов является использование перлитных сталей с увеличенным содержанием углерода до заэвтектоидного уровня. Установлено, что по сравнению с рельсами доэвтектоидного состава заэвтектоидные рельсы обладают лучшей износостойкостью и имеют значительно меньшие потери на износ, а поверхностные слои обладают субзеренной структурой с высоким содержанием высоко- и малоугловых границ зерен, перлитных колоний и субколоний, и почти не имеют цементита по границам. Несмотря на то, что в научной литературе присутствует достаточное количество публикаций по рельсам из заэвтектоидной стали, описание микроструктуры остается недостаточно полным.

Целью настоящей работы являлось исследование структуры и фазового состава металла выкружки рельса типа Р65 категории ДТ400ИК (категория дифференцированно упрочненных железнодорожных рельсов с повышенной износостойкостью и контактной выносливостью) из стали марки 90ХАФ, изъятого после длительной эксплуатации на Восточно-Сибирской железной дороге по дефекту, классифицированному согласно инструкции по коду 44.0 – боковой износ головки рельса сверх допускаемых норм (по всей длине рельса). Анализировали структурно-фазовое состояние фрагмента рельсовой стали в слое, расположенном на расстоянии 10 мм от поверхности по оси выкружки. Установлено, что в слое, расположенном на глубине 10 мм формируется преимущественно структура перлита пластинчатой морфологии. Анализ дефектной структуры пластинчатого перлита выполнен на нескольких структурно-масштабных уровнях (макро-, микро-, субмикро- и нано-масштабный уровни). Показано, что исследуемая сталь характеризуется наличием внутренних полей напряжений, имеющих чисто упругий характер. Источниками полей напряжений являются границы раздела колоний перлита и некоторой совокупности пластин в пределах одной колонии, границы раздела пластин феррита и цементита.

Установлено, что структура фрагмента рельсовой стали сформирована зернами перлита пластинчатой морфологии различной степени совершенства. В объеме пластин феррита выявлены наноразмерные (10-15 нм) частицы третичного цементита, расположенные, предположительно, на линиях дислокаций. Выполнен анализ дефектной структуры пластинчатого перлита на нескольких структурно-масштабных уровнях: на макромасштабном уровне (уровень некоторой совокупности зерен) выявлены области, в которых зерна перлита изогнуты определенным образом; на микромасштабном уровне (уровне отдельных колоний перлита) обнаружены перлитные колонии, в объеме которых выявляются области с разрушенными пластинами цементита; на субмикромасштабном уровне (уровне отдельных пластин феррита колоний перлита) исследуемая сталь характеризуется фрагментацией пластин феррита и наличием дислокационной субструктуры.

Исследование проведено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 075-00087-2401.

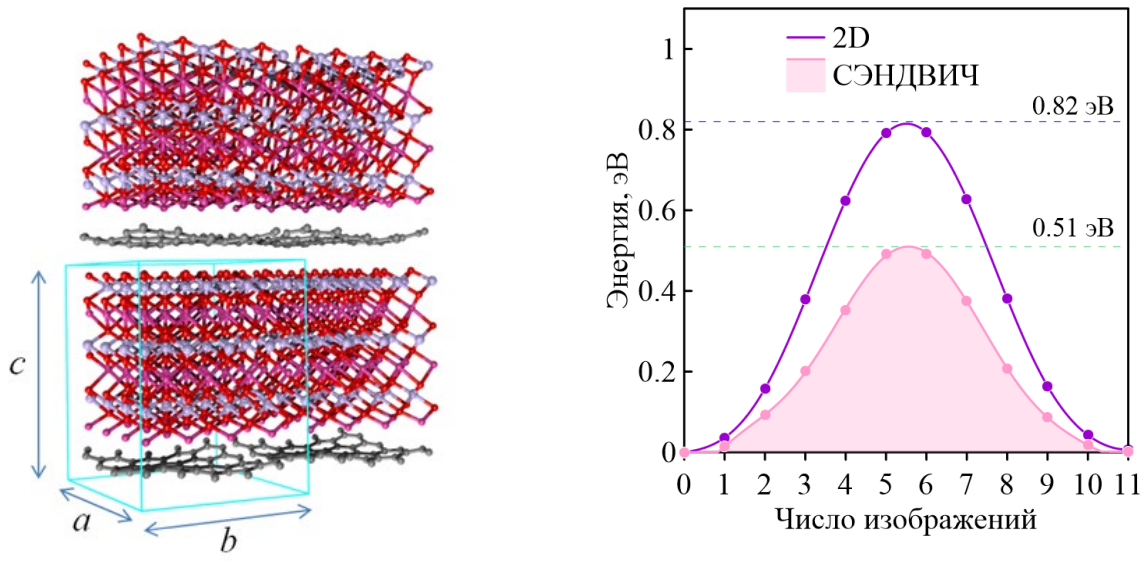
КВАНТОВАЯ ЁМКОСТЬ КОМПОЗИТА ГРАФЕН/LCO В ПРОЦЕССЕ ЛИТИРОВАНИЯ

В.В. Шунаев, А.А. Петрунин, О.Е. Глухова

Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского, г. Саратов
shunaevvv@sgu.ru

Современное развитие энергетики и электротранспорта требует создания долговечных и высокоэффективных электродных материалов для литий-ионных аккумуляторов и суперконденсаторов [1]. Катодные материалы на основе $LiCoO_2$ (LCO) обладают высокой теоретической емкостью (~275 мА·ч/г), однако их применение ограничено структурной деградацией и низкой электронной проводимостью [2]. Перспективным решением является создание композитов LCO с графеном, который обеспечивает механическую стабильность и высокую ионную проводимость [3]. Экспериментальные работы демонстрируют улучшение электрохимических характеристик графен-модифицированного LCO, однако фундаментальные аспекты взаимодействия компонентов на атомном уровне, влияние архитектуры композита и массовой доли углерода на квантовую емкость остаются недостаточно изученными. Настоящая работа посвящена первопринципному исследованию электронных и емкостных свойств двумерных и сэндвич-структур G/LCO с различным массовым соотношением компонентов.

В работе методами теории функционала плотности (DFT) проведено систематическое исследование электронных и емкостных свойств композитов на основе графена (G) и оксида лития-кобальта $LiCoO_2$ (LCO) в двух архитектурах: двумерной пленке (G/LCO) и периодической сэндвич-структуре с чередующимися слоями. Рассмотрены структуры с массовыми соотношениями компонентов от 8:1 до 1:1, регулируемыми числом слоев графена [4].



а б

Рис. 1. Композит G/LCO: (а) расширенная ячейка типа сэндвич с массовым соотношением *m(LCO):m(G)* = 8:1; (б) дифузионный барьер миграции лития для двумерной плёнки и композита типа сэндвич

Показано, что переход от изолированной двумерной пленки к сэндвич-структуре с соотношением m(LCO):m(G) = 8:1 приводит к кардинальному изменению электронной структуры: энергия связи E_b возрастает с –6.88 до –25.72 эВ, заряд, перетекающий от графена к LCO, увеличивается с 0.28e до 1.25e, а уровень Ферми смещается в область более

отрицательных значений (от –6.82 до –8.17 эВ) (Таблица 1). Дальнейшее увеличение числа слоев графена ослабляет эти эффекты из-за электростатического экранирования и перехода к свойствам, характерным для графита.

Таблица 1. Электронно-энергетические параметры систем графен/LCO типа сэндвич и двумерной плёнки графен/LCO

m(LCO):*m*(G)	E_b, эВ	E_F, эВ	$C_q^{diff}(0)$, Ф/г	σ_A (IL), Кл/г	σ_C (IL), Кл/г	σ_A / σ_C (ИЖ)
8:1	–25.72	–8.17	393.92	1741.47	2035.66	0.86 (К)
4:1	–21.96	–8.07	284.49	1612.24	1949.08	0.83 (К)
2:1	–17.73	–7.83	299.98	1391.26	1755.55	0.79 (К)
1:1	–8.41	–7.57	286.50	1096.10	1489.72	0.74 (К)
2D 8:1	–6.88	–6.82	113.00	1398.55	1973.24	0.71 (К)

Установлено, что сэндвич-структура с одним слоем графена (8:1) обладает максимальной дифференциальной квантовой емкостью $C_q^{diff}(0)$ при нулевом напряжении (394 Ф/г), что в 3.5 раза превышает значение для двумерного аналога и в 5.4 раза — для чистого LCO. Анализ поверхностной плотности заряда в рабочих окнах водного электролита (±0.6 В) и ионной жидкости (±1.2 В) показал, что данная структура характеризуется наиболее высокими абсолютными значениями как анодного, так и катодного заряда, а отношение σ_a/σ□ приближается к единице (0.92 для воды и 0.86 для ионной жидкости), что свидетельствует о симметричном электрохимическом отклике.

Рассчитанный с использованием метода упругой ленты (NEB) барьер диффузии лития в сэндвич-структуре 8:1 снижается до 0.51 эВ по сравнению с 0.82 эВ для двумерной пленки, что указывает на ускоренную кинетику литирования/делитирования.

Исследование температурной зависимости квантовой емкости в диапазоне 233–353 К подтверждает повышенную термическую стабильность графен-модифицированных структур: коэффициент роста емкости при нагревании уменьшается с 2.69 для чистого LCO до 1.54 для сэндвича 8:1, что коррелирует с экспериментальными данными по повышению температуры экзотермического разложения и стабильной работе ячеек в широком интервале температур.

Таким образом, сэндвич-структура G/LCO с массовым соотношением 8:1 представляет собой наиболее перспективный кандидат для создания высокоэффективных катодных материалов благодаря оптимальному сочетанию высокой квантовой емкости, улучшенной транспортной кинетики, симметричного электрохимического отклика и повышенной тепловой стабильности.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 25-22-00290).

Литература

1. K.R. Ngoy, V.T. Lukong, K.O. Yoro, J.B. Makambo, N.C. Chukwuati, C. Ibegbulam, O. Eterigho-Ikelegbe, K. Ukoba, T.-C. Jen. Lithium-ion batteries and the future of sustainable energy: a comprehensive review. Renew. Sustain. Energy Rev., 2025, 223 115971.
2. D. Chao, L. Wang, W. Shen, S. Guo. Effects of the lateral sizes and basal plane structure of graphene on the electrochemical properties of LiCoO2. J. Alloys Compd., 2019, 785, 557-562.
3. W. Nan. LiCoO2 Cathode modified with liquid-exfoliated graphene for high-performance full batteries. J. Phys.: Conf. Ser., 2023, 2655 012012.
4. V.V. Shunaev, A.A. Petrunin, O.E. Glukhova. Graphene/$LiCoO_2$ thin films as promising cathode materials for li-ion batteries: An ab initio study. Surfaces and Interfaces, 2025, 77 107973.

ИЗМЕНЕНИЕ ТРИБОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК И ТОПОГРАФИИ ПОВЕРХНОСТИ ЭПИХЛОРГИДРИНОВЫХ КАУЧУКОВ ПРИ ДОБАВЛЕНИИ В ИХ СОСТАВ НАНОАЛМАЗОВ

О.О. Щербакова, П.О. Буковский, Т.И. Муравьева

Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва
shcherbakovaoo@mail.ru

Работа оборудования в арктических условиях сопряжена с воздействием экстремальных факторов [1]. Частой причиной отказов техники, особенно в труднодоступных районах, становится разрушение или потеря свойств резинотехнических деталей (уплотнений, манжет, шлангов), обеспечивающих герметичность и защиту узлов промышленных установок. К таким материалам предъявляются строгие требования - помимо прочности и релаксационных свойств, принципиальное значение приобретает морозостойкость, способность сохранять эластичность при низких температурах.

Перспективной основой для арктических резинотехнических изделий являются эпихлоргидриновые каучуки (ЭПХГ) [1], сочетающие низкую температуру стеклования с устойчивостью к маслам, нефтепродуктам, озону и другим агрессивным средам. Дальнейшее улучшение их эксплуатационных свойств возможно за счёт введения наполнителей, в частности наноалмазов (НА) — углеродных частиц размером в единицы–десятки нанометров. НА обладают высокой твёрдостью, модулем Юнга, теплопроводностью и химической стабильностью при относительно доступной стоимости. Механизм упрочнения включает распределение нагрузки, формирование развитого интерфейса с матрицей благодаря наноразмеру частиц и ограничение подвижности полимерных цепей, что повышает модуль упругости композита.

Введение НА в ЭПХГ позволяет целенаправленно менять трибологические характеристики, однако эффект неоднозначен: те же свойства могут как улучшать, так и ухудшать показатели трения и износа в зависимости от концентрации. Известно, что даже малые добавки НА существенно снижают износ в различных полимерных системах. При этом коэффициент трения может возрастать за счёт механического зацепления частиц или, напротив, уменьшаться при образовании смазывающего слоя из НА. Таким образом, ключевая задача — подбор оптимального содержания наполнителя. В данной работе исследована серия образцов ЭПХГ с различным количеством НА для определения их оптимальной концентрации.

В данной работе исследовалось, как введение наноалмазов в различных концентрациях сказывается на коэффициенте трения и износостойкости морозостойких резин, полученных на основе эпихлоргидринового каучука.

Объектами исследования являлись образцы, полученные на базе эпихлоргидринового каучука (ЭПХГ). Варьируемым параметром выступала дозировка наноалмазов, которую изменяли в диапазоне от 0 до 10 массовых частей в расчёте на 100 массовых частей каучука.

Для проведения трибологических испытаний применялся лабораторный трибометр MFT-5000. Схема контакта реализовывалась по конфигурации «кольцо–диск», а нагружение осуществлялось в условиях однонаправленного скольжения. В качестве контртела при определении коэффициента трения служил диск из нержавеющей стали. В экспериментах по оценке износостойкости вместо гладкого диска использовалась абразивная бумага с размером зерна 120 мкм. Морфологию поверхности образцов исследовали методом сканирующей электронной микроскопии с использованием микроскопа FEI QUANTA 650. Съёмку выполняли при ускоряющем напряжении 25 кВ, в режиме детектирования вторичных электронов.

На рис. 1 представлены зависимости коэффициента трения от скорости скольжения для нормального давления P = 0.1 МПа (а,в) и P = 0.4 МПа (б,г) и двух различных

температур T = 22°C (сплошная линия) и T = –25°C (пунктирная линия), где 1-5 – номера образцов.

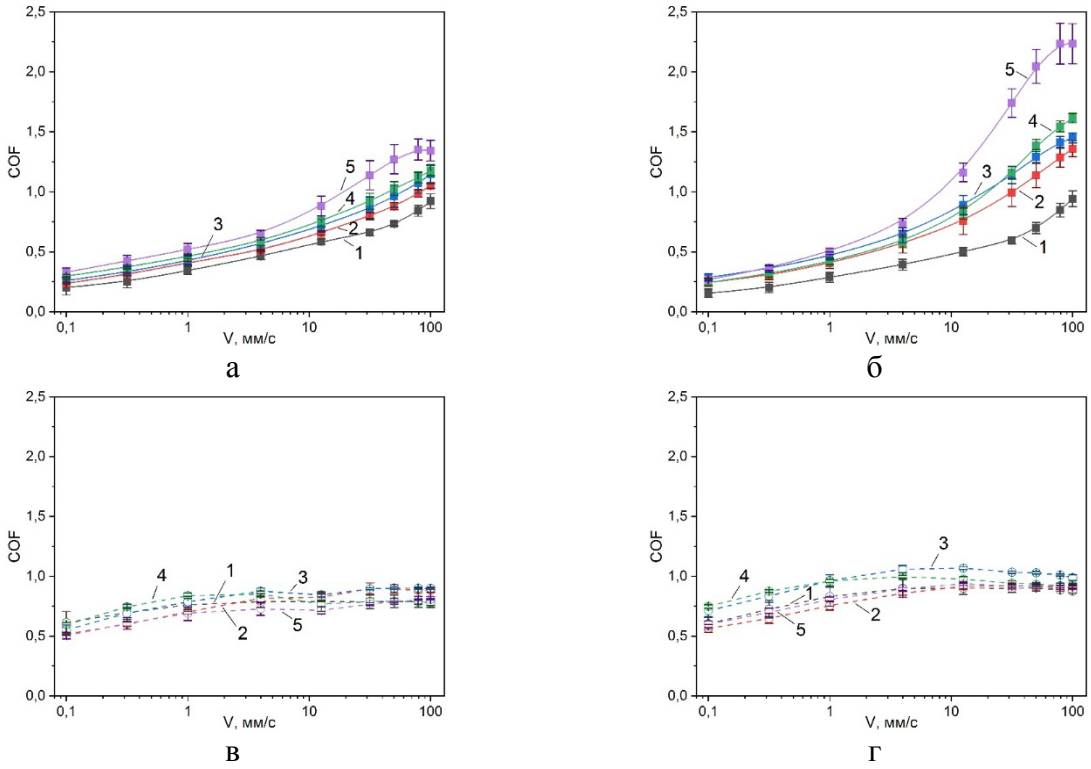


Рис. 1. Зависимость динамического коэффициента трения от скорости скольжения

На рис. 2 приведены результаты оценки износостойкости образцов резины. Испытания проводили при следующих условиях: путь трения — 4 м, удельное давление P = 0,4 МПа, температура T = 22 °C. Представленные значения получены путём усреднения данных по потере массы трёх идентичных образцов.

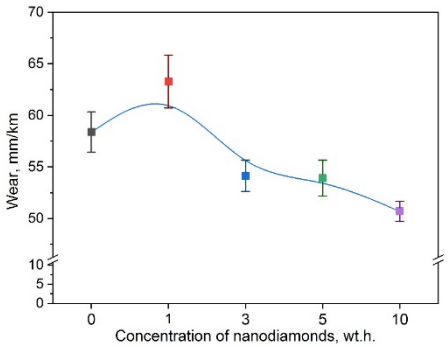
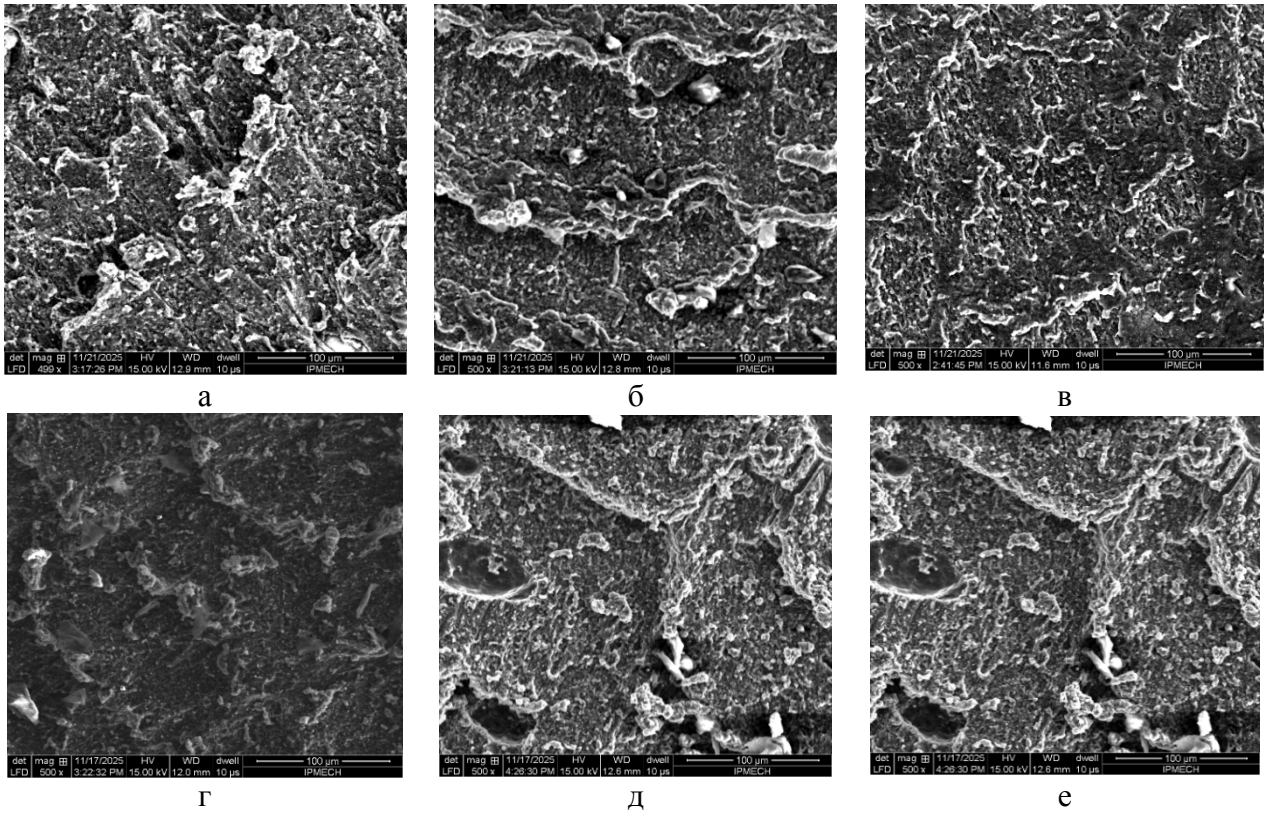


Рис. 2. Зависимость интенсивности изнашивания от концентрации наноалмазов в матрице ЭПХГ каучука

Исследования показали, что модификация наноалмазами приводит к росту динамического коэффициента трения в паре со сталью. Установлено, что при комнатной температуре на трение влияет преимущественно адгезионный механизм: с ростом скорости скольжения и концентрации НА (из-за снижения шероховатости) коэффициент трения увеличивается. При отрицательных температурах (–25 °C) динамика трения меняется: появляется немонотонная зависимость с максимумом, что говорит о переходе к деформационному механизму трения; это связано с сохранением эластичности и реологических свойств морозостойкой резины при данной температуре. Износостойкость

демонстрирует нелинейную зависимость от концентрации НА: минимальные добавки (1 мас. ч.) ухудшают показатели, средние (3–5 мас. ч.) — улучшают, а максимальный эффект достигается при 10 мас. ч. модификатора. Анализ поверхности показал, что оптимальная структура (наиболее плотная и мелкоячеистая) формируется при введении 10 мас. ч. НА.

Топография поверхности образцов после проведения трибологических испытаний, была изучена с помощью сканирующей электронной микроскопии В качестве иллюстрации на рисунке представлены СЭМ-изображения поверхности двух образцов: содержащего 1 мас. ч. НА и содержащего 10 мас. ч. НА.



а б в

г д е

Рис. 4. СЭМ изображения поверхностей образцов с 0 масс. ч. НА (а,г), с 1 масс. ч. НА (б,д) и 10 масс. ч. НА (в, е): а, б, в - после испытаний по стали при – 25°С; г, д, е - после испытаний на износ (по шкурке 120 мкм)

Ключевым фактором, определяющим рельеф изношенной поверхности, является содержание НА в составе композита. При наибольшей дозировке наполнителя (10 мас. ч. НА) рабочая поверхность после тестирования характеризуется минимальной степенью разрушения и повышенной гладкостью, что хорошо коррелирует с показателями интенсивности изнашивания. Результаты электронной микроскопии служат дополнительным подтверждением закономерностей, выявленных при трибологических испытаниях: именно добавление 10 мас. ч. наноалмазов позволяет получить максимально гомогенную и устойчивую к износу поверхность эластомерного материала.

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ 23-19-00484П.

Литература

1. V.V. Portniagina, N.N. Petrova, V.V. Mukhin, E.N. Timofeeva, T.A. Gavriliev Elastomeric materials for mining equipment operating in the Far North. Chimia - Tomsk State University Journal of Chemistry, 2024, 35, 152-167.

РАЗРАБОТКА И ИССЛЕДОВАНИЕ НОВЫХ ЦИРКОНИЕВЫХ СПЛАВОВ ДЛЯ ЯДЕРНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

Н.Р. Юсупова, А.А. Ганеев, В.М. Имаев, Р.М. Имаев

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
yusupovanelli1@gmail.com

Циркониевые сплавы широко применяются в ядерной энергетике, благодаря малому поперечному сечению захвата тепловых нейтронов, высокой температуре плавления и отличной коррозионной стойкости, где они преимущественно используются в качестве оболочки тепловыделяющего элемента [1-3]. Однако основным недостатком циркониевых сплавов является их эксплуатационный температурный предел, ограниченный значениями 320–350 ℃. Повышение температуры ведёт к резкому ухудшению механических свойств, в частности жаропрочности и сопротивления ползучести. Основная причина заключается в термической нестабильности □Zr матрицы, которая не выдерживает высоких напряжений при ползучести. Одним из решений является переход к двухфазным структурам с термически стабильной интерметаллидной фазой. Увеличение рабочего температурного диапазона сплавов на основе циркония до 500-600 ℃ является важной задачей, которая должна быть достигнута в первую очередь за счет разработки новых сплавов. В настоящей работе исследуются механические свойства при повышенных температурах новых многокомпонентных сплавов на основе циркония, легированные Al, Nb, Sn и Si.

Модельные слитки получены аргонно-дуговой плавкой с многократным переплавом для обеспечения химической однородности. Для формирования однородной мелкозернистой структуры заготовки подвергаются изотермической трехмерной ковке при 800 ℃ (скорость деформации ~10^{-3} $с^{-1}$, суммарная степень деформации □≈ 3) с последующим отжигом при 850 ℃ в течение 3 часов и охлаждением с печью.

Фазовый состав и микроструктуру изучаются методами рентгеноструктурного анализа (Cu-K□излучение □= 1.54 Å), сканирующей электронной микроскопии в режиме отраженных электронов (BSE) и ориентационной микроскопии (EBSD). Механические испытания на растяжение проведены в диапазоне 20-600 ℃ при начальной скорости деформации 8.3×10^{-4} $с^{-1}$. Ползучесть оценивали при 500 и 600 ℃ под постоянным напряжением 120 МПа.

Применение изотермической трехмерной ковки и последующего отжига позволяет сформировать однородную мелкозернистую структуру с высоким содержанием упрочняющей интерметаллидной фазы Zr_3Al (30-40 об.%). Добавки Nb, Sn, Si замедляют диффузию, способствуют рекристаллизации и повышают термическую стабильность микроструктуры. Новые сплавы демонстрируют высокое сочетание прочности и пластичности при комнатной температуре, а также повышение жаропрочности и сопротивления ползучести при температурах до 600 ℃, что значительно расширяет температурный диапазон работоспособности циркониевых материалов.

Литература

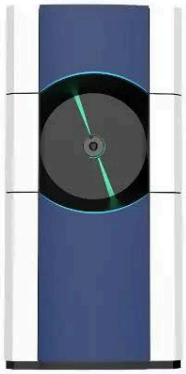
1. R.R. Odette, S.J. Zinkle. Structural Alloys for Nuclear Energy Application. Elsevier, Cambridge, 2019, 648 p.
2. T. Alam, K. Khan, M. Pathak, K. Ravi. A review on the clad failure studies. Nucl. Eng. Des., 2011, 241 (9) 3658-3677.
3. J. Eriksson, G. Sundell, P. Tejland, H.-O. Andren, M. Thuvander. Nanoscale chemistry of Zircaloy-2 exposed to three and nine annual cycles of boiling water reactor operation - an atom probe tomography study. J. Nucl. Mater. 2022, 561 153537.



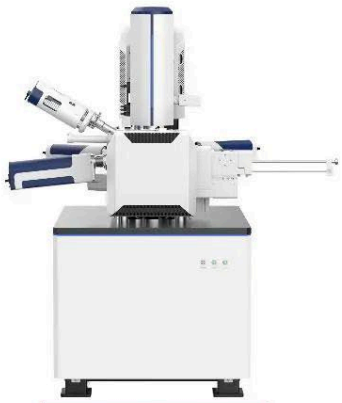
IQSCAN HEM
Высокоскоростной SEM
1.5 нм при 1 кВ SE
10 кс/пиксель



IQSCAN FIB55
Двухлучевой микроскоп FIB-SEM
0.9 нм при 15 кВ SE / SEM
3 нм при 30 кВ SE / FIB



IQSCAN TEM120
Просвечивающий
электронный микроскоп
0.14 нм при 120 кВ



IQSCAN F40
Базовый SEM с катодом Шоттки
1 нм при 15 кВ SE

ИНСКАН



IQSCAN F50
SEM сверхвысокого разрешения
0.7 нм при 15 кВ SE

Сканирующая электронная микроскопия

Просвечивающая электронная микроскопия

Оборудование для пробоподготовки



IQSCAN W21
Упрощённая модель термоэмиссионного SEM
3 нм при 30 кВ SE

Москва
2-й Южнопортовый проезд 33с1

Санкт-Петербург
2-й Муринский проспект 36

Екатеринбург
ул. Куйбышева 55

info@inscan.ru



IQSCAN W32
Базовый термоэмиссионный SEM
3 нм при 30 кВ SE

Содержание

Стр.

Najafova G.Z., Agaeva G.A.
SECONDARY STRUCTURE OF BETA-AMYLOID (25–35) DETERMINED BY DIFFERENT SPECTROSCOPIC METHODS……..…….. 3

Orujova T.I., Gahramanova G.K., Jabbarov R.B.
DSC INVESTIGATION OF THERMAL BEHAVIOR OF AACVD SYNTHESIZED MWCNT/EPOXY NANOCOMPOSITES……...……. 5

Jabborov Kh.I.
MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF NICKEL EXOATOM MIGRATION ON THE C20 FULLERENE SURFACE…….. 7

Urolov I.Z., Yadgarov I.D., Khalilov U.B.
MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF THE ADSORPTION OF C20 FULLERENE MOLECULE ON RECONSTRUCTED SILICON Si(001)-2×1 AND Si(111)-7×7 SURFACES……..…. 9

Абдуллина Д.У., Дмитриев С.В.
НЕЛИНЕЙНАЯ ДИНАМИКА КРИСТАЛЛОВ СО СТРУКТУРОЙ B2: ДЕЛОКАЛИЗОВАННЫЕ МОДЫ И ДИСКРЕТНЫЕ БРИЗЕРЫ В CsCl, LiPb И NiTi……..…….. 11

Автократова Е.В., Ситдиков О.Ш., Валеева А.Х., Валеев И.Ш., Загитов Р.Р., Маркушев М.В.
ВЛИЯНИЕ СТЕПЕНИ КРИОГЕННОЙ ПРОКАТКИ НА СТРУКТУРУ И КОРРОЗИОННУЮ СТОЙКОСТЬ НИКЕЛЯ……..…..... 13

Аккузин С.А., Полехина Н.А., Ким А.В., Литовченко И.Ю.
МИКРОСТРУКТУРА И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СТАБИЛЬНОЙ АУСТЕНИТНОЙ СТАЛИ ПОСЛЕ КРИОГЕННОЙ И ПОСЛЕДУЮЩЕЙ ТЕПЛОЙ ПРОКАТКИ ПРИ 600 °C……. 16

Альсаймари Н.М., Хотинов В.А.
ОЦЕНКА АНИЗОТРОПИИ МАГИСТРАЛЬНОГО НЕФТЕПРОВОДА ПУТЕМ АНАЛИЗА МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПРИ РАСТЯЖЕНИИ…….…... 17

Алябьев Д.В., Ядгаров И.Д.
СОЗДАНИЕ ML-ПОТЕНЦИАЛА КЛАССИЧЕСКОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ (LAMMPS) НА БАЗЕ MLIP ДЛЯ ОБЪЕМНОГО КРИСТАЛЛА ReS2…….……. 20

Арсланов А.Р., Чуракова А.А.
ИССЛЕДОВАНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ И МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СПЛАВА TI-45NI-5CU ПОСЛЕ РКУП…….…… 22

Астапов Д.О., Данилова Л.В., Астафурова Е.Г.
АНАЛИЗ ПАРАМЕТРОВ ТЕРМОУПРУГОГО ГЦК-ГПУ МАРТЕНСИТНОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ В МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СПЛАВАХ (Co35Cr20Fe20Mn20Ni5)100-xSix (x = 0, 1, 3, 5)……..… 25

Астафуров С.В., Мельников Е.В., Загибалова Е.А., Данилова Л.В., Лучин А.В., Лысунец М.А.
ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ПОВЫШЕНИЯ ПРОЧНОСТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ВЫСОКОЭНТРОПИЙНОГО СПЛАВА КАНТОРА ПУТЕМ ПОВЕРХНОСТНОГО ИОННО-ПЛАЗМЕННОГО НАСЫЩЕНИЯ АТОМАМИ ВНЕДРЕНИЯ……... 28

Астафурова Е.Г., Астапов Д.О., Астафуров С.В., Мельников Е.В., Загибалова Е.А., Данилова Л.В., Лучин А.В.
ФИЗИЧЕСКАЯ ПРИРОДА ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ПРЕДЕЛА ТЕКУЧЕСТИ И ЭФФЕКТА ПАМЯТИ ФОРМЫ В НОВЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СПЛАВАХ (Co35Ni5Cr20Fe20Mn20)100-xBx……..... 29

Астахов И.И., Климова М.В., Клименко Д.Н., Задыкян Г.Г., Климова-Корсмик О.Г., Корсмик Р.С., Степанов Н.Д.
РАЗРАБОТКА И АДАПТАЦИЯ ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ ЖС6К ДЛЯ АДДИТИВНОГО ПРОИЗВОДСТВА……..….. 30
Асфандияров Р.Н., Аксенов Д.А., Рааб А.Г., Шишкунова М.А., Фаррахов Р.Г., Сиразеева А.Р.
ВЛИЯНИЕ ЭКСТРУЗИИ, СОВМЕЩЕННОЙ С РКУП И УЛЬТРАЗВУКОМ, НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА СПЛАВА СИСТЕМЫ MG-ZN-ZR…… 32
Атанов Б.И.
ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО ОСАЖДЕНИЯ НИКЕЛЕВОГО ПОКРЫТИЯ НА УГЛЕРОДНОЕ ВОЛОКНО……..……. 34
Ахунова А.Х., Баимова Ю.А.
ДЕФОРМАЦИЯ И РАЗРУШЕНИЕ ГРАФИНОВ ПРИ ОДНООСНОМ РАСТЯЖЕНИИ……...……..… 35
Баимова Ю.А., Крылова К.А., Рожнова Е.А.
ЗАЩИТНЫЕ ПОКРЫТИЯ НА ОСНОВЕ СКОМКАННОГО ГРАФЕНА: МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ…… 36
Балбашио Б., Скрылев А.А., Шестаков Д.В., Виноградова Л.М., Нежданов А.В., Машин А.И.
К ВОПРОСУ О КОЛИЧЕСТВЕННОЙ ОЦЕНКЕ КАТИОННОЙ РАЗУПОРЯДОЧЕННОСТИ В ТОНКИХ ПЛЁНКАХ ZnSnN2: СОПОСТАВЛЕНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА И РАСЧЁТОВ PBE--HSE06 ДЛЯ УПОРЯДОЧЕННОЙ И SQS-СТРУКТУР……... 37
Барков П.В., Слепченков М.М., Давыдова М.А.
ВЛИЯНИЕ ШИРИНЫ ШЕЙКИ НА ЭНЕРГЕТИЧЕСКУЮ ЩЕЛЬ И ОПТИЧЕСКУЮ ПРОВОДИМОСТЬ ПЕРФОРИРОВАННОГО ГРАФЕНА...……... 39
Бассареев А.А., Крылова К.А.
СОРБЦИЯ АТОМОВ ВОДОРОДА СКОМКАННЫМ ГРАФЕНОМ РАЗНОЙ ПЛОТНОСТИ……...…… 42
Безверхий Д.С., Кондратьев Н.С., Балдин М.Н., Гошкодер А.А., Шарифуллина Э.Р.
ОПИСАНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ ЗЕРЕННОЙ СТРУКТУРЫ АЛЮМИНИЕВЫХ СПЛАВОВ СЕРИИ 5XXX ПРИ ГОРЯЧЕМ ДЕФОРМИРОВАНИИ……..… 45
Бирюков М.А., Песин А.М., Бирюкова О.Д., Пустовойтов Д.О.
ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НЕРЖАВЕЮЩЕЙ СТАЛИ ПРИ ГОРЯЧЕЙ АСИММЕТРИЧНОЙ ПРОКАТКЕ……. 47
Буковский П.О., Щербакова О.О., Муравьева Т.И., Демченко Д.В.
ТРИБОЛОГИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПЛЕТЕНЫХ САЛЬНИКОВЫХ УПЛОТНЕНИЙ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ С ШЕРОХОВАТЫМ ТЕЛОМ……... 49
Вагапов Р.К., Кантюков Р.Р., Запевалов Д.Н.
ОСОБЕННОСТИ КОРРОЗИОННЫХ ПРОЯВЛЕНИЙ НА ПОВЕРХНОСТИ ТРУБНЫХ СТАЛЕЙ ВО ВЛАЖНЫХ ГАЗОВЫХ СЕРОВОДОРОДНЫХ И УГЛЕКИСЛОТНЫХ СРЕДАХ……. 52
Валеева А.Х., Валеев И.Ш., Автократова Е.В., Ситдиков О.Ш., Маркушев М.В.
ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОИМПУЛЬСНОЙ ОБРАБОТКИ НА КОРРОЗИОННУЮ СТОЙКОСТЬ КРИОКАТАНОГО НИКЕЛЯ……. 55
Валитов В.А.
ПРИМЕНЕНИЕ СВЕРХПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ С МЕЛКОЗЕРНИСТОЙ И УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОЙ СТРУКТУРОЙ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ РАЗЛИЧНЫХ ДЕТАЛЕЙ ГТД……. 57

Волкова Н.П., Волков А.В., Гребеньщиков А.С., Ледер М.О.
ТИТАНОВЫЕ СПЛАВЫ ДЛЯ ПРУЖИН……..... 59
Габбасов Р.Р., Галиева Э.В., Валитов В.А.
МИКРОСТРУКТУРА И ПРОЧНОСТЬ ТВЕРДОФАЗНЫХ СОЕДИНЕНИЙ
ЭП975//ВКНА-1В……..……... 60
Гайфуллин Р.Ю., Нагимов М.И., Митюк В.И., Алиев А.М., Мухучев А.А.,
Кадырбардиев А.Т., Мусабиров И.И.
МАГНИТОЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ МАРТЕНСИТНОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ
И МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В СПЛАВЕ Ni50Mn18.5Ga25Cu6.5,
ПОДВЕРГНУТОМ ВСЕСТОРОННЕЙ ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ КОВКЕ……...….... 61
Галиахметова Л.Х., Мурзаев Р.Т., Баимова Ю.А.
ВЛИЯНИЕ СКРЕПЛЯЮЩЕГО СЛОЯ НА ДИНАМИКУ УГЛЕРОДНЫХ
НАНОТРУБОК ПРИ ПОСТОЯННОЙ НАГРУЗКЕ ……...…….. 63
Галиева Э.В.
МИКРОСТРУКТУРА И СВОЙСТВА ТВЕРДОФАЗНЫХ СОЕДИНЕНИЙ
ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ С ИНТЕРМЕТАЛЛИДНЫМИ
СПЛАВАМИ НА ОСНОВЕ Ni_3Al…….…… 64
Галимов А.К., Лутфуллин Р.Я., Мухаметрахимов М.Х.
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ
ИССЛЕДОВАНИЕ ТВЕРДОФАЗНОЙ СВАРИВАЕМОСТИ ТИТАНОВОГО
И МАГНИЕВОГО СПЛАВОВ……..….. 65
Галышев С.Н.
СОПРОТИВЛЕНИЕ УСТАЛОСТИ УГЛЕ-АЛЮМИНИЕВОГО КОМПОЗИТА…….. 68
Гареев Т.И., Смовж Д.В.
ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОМПОЗИТОВ
ГРАФЕН-НАНОЧАСТИЦЫ ОЛОВА……..….. 69
Гатиятуллина Д.Д., Землянов А.В., Балохонов Р.Р.
ВЛИЯНИЕ ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ НА ЗАКОНОМЕРНОСТИ
ДЕФОРМАЦИОННОГО ПОВЕДЕНИЯ И РАЗРУШЕНИЯ
МЕТАЛЛОКЕРАМИЧЕСКИХ КОМПОЗИТОВ……..…. 71
Гладких П.А., Швейкин А.И.
ПРИМЕНЕНИЕ СУРРОГАТНЫХ МОДЕЛЕЙ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ
РЕКУРРЕНТНЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ПРОЦЕССОВ
ОБРАБОТКИ МЕТАЛЛОВ ДАВЛЕНИЕМ……..……. 74
Головина Н.Я.
СТРУКТУРНАЯ ТЕОРИЯ ДЕФОРМИРОВАНИЯ: ВАРИАЦИОННЫЙ ПОДХОД,
УСЛОВИЯ ГЛАДКОСТИ И ИНВАРИАНТНЫЙ БАЗИС ОПЕРАТОРОВ
УПРУГОПЛАСТИЧЕСКОГО ОТКЛИКА……..... 76
Гордиенко А.В., Белякова Т.А.
СВЕРХПЛАСТИЧЕСКАЯ ФОРМОВКА ЛИСТОВОЙ ЗАГОТОВКИ
ИЗ УПРОЧНЯЮЩЕГОСЯ МАТЕРИАЛА В КЛИНОВИДНУЮ МАТРИЦУ
С РАЗЛИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ КОНТАКТА……...…… 78
Гребенщиков О.Р., Гребенщикова М.М., Герасимов А.В.
ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА УСЛОВИЙ МОДИФИКАЦИИ ПОВЕРХНОСТИ
МНОГОСЛОЙНЫХ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ПОКРЫТИЙ НА ОСНОВЕ
НИТРИДОВ ГАФНИЯ И ТИТАНА ПОТОКОМ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ
ИОНОВ……..……. 81
Грекова А.А., Гришаков К.С., Маслов М.М.
ВЛИЯНИЕ ЛЕГИРУЮЩИХ ПРИМЕСЕЙ АЗОТА И БОРА НА СТРУКТУРНЫЕ
И ЭЛЕКТРОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ АВ-ДИАМАНОВ……. 83

Грушина В.В., Исаева И.Ю., Остаева Г.Ю.
СПОСОБ СИНТЕЗА НАНОЧАСТИЦ МЕДИ, КАК ОПРЕДЕЛЯЮЩИЙ ФАКТОР НАСЫЩЕНИЯ ЦЕОЛИТОВ……..... 86
Гундеров Д.В., Edalati K., Асфандияров Р.Н., Сергеев С.Н., Кадиров П.О., Шарафутдинов А.В., Валиев Р.З.
ЛОКАЛИЗАЦИЯ ДЕФОРМАЦИИ – ПРИЧИНА НЕРЕАЛИЗАЦИИ ДЕФОРМАЦИИ В ОБЪЕМЕ ОБРАЗЦА ПРИ КВД……... 87
Гуртова Д.Ю., Астафурова Е.Г.
МИКРОСТРУКТУРА, ФАЗОВЫЙ СОСТАВ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МНОГОКОМПОНЕНТНОГО СПЛАВА Fe50Mn30Co10Cr10, ЛЕГИРОВАННОГО АЗОТОМ И БОРОМ……..... 89
Гуткин М.Ю., Скиба Н.В., Орлова Т.С.
РОЛЬ ЗЕРНОГРАНИЧНЫХ ДИСЛОКАЦИЙ, ВЫДЕЛЕНИЙ И СЕГРЕГАЦИЙ ПРИМЕСЕЙ В УПРОЧНЕНИИ И ПЛАСТИЧНОСТИ УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТЫХ АЛЮМИНИЕВЫХ СПЛАВОВ: ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ФАКТЫ И ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ……..... 91
Давыдов Д.И., Карамышев К.Ю., Пудова Н.В., Линцев М.В., Хлебникова Ю.В.
АНАЛИЗ СТРУКТУРНО-ФАЗОВОГО СОСТОЯНИЯ НОВЫХ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВОВ Ni-Co-Si-Ti-Al И Ni-Co-Si-Ti-Al-B……..... 93
Давыдова Н.А., Соболева Н.Н., Веселова В.Е., Бахтеев И.С., Березовский А.В.
СТРУКТУРА МЕТАЛЛА, СФОРМИРОВАННОГО ЛАЗЕРНОЙ НАПЛАВКОЙ АЗОТСОДЕРЖАЩЕЙ ПРОВОЛОКИ…….…….. 95
Даниленко В.Н., Шугубаева С.Б., Киеккужина Л.У.
ТВЕРДОФАЗНОЕ СОЕДИНЕНИЕ НИОБИЯ И АЛЮМИНИЯ……..……... 96
Дегтярева С.П., Ланин А.А., Пескишев С.А.
РАЗВИТИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ УСТАЛОСТИ В ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ…….…….. 97
Дегтярева С.П., Демко А.В., Земляков Е.В., Ланин А.А.
СПЕЦИФИКА ТЕРМИЧЕСКОЙ УСТАЛОСТИ СВАРНЫХ ИЗДЕЛИЙ, РАБОТАЮЩИХ В РЕЖИМЕ ТЕПЛОСМЕН…….……. 99
Дихтяр Ю.Ю., Атанов Б.И., Яковлев И.И., Капитанова О.И.
СОЗДАНИЕ ПЛОТНОГО КОНТАКТА МЕЖДУ ИНТЕРФЕЙСАМИ ПОЛНОСТЬЮ ТВЕРДОТЕЛЬНОГО АККУМУЛЯТОРА…….. 101
Дмитриев А.И., Акимов К.О., Иванов К.В.
ИССЛЕДОВАНИЕ УСЛОВИЙ ФОРМИРОВАНИЯ УСТОЙЧИВОЙ УПАКОВКИ ПОРОШКОВ Al–Fe/Fe2O3 ПРИ СМЕШИВАНИИ В БАРАБАННОМ СМЕСИТЕЛЕ…….. 102
Долгий Д.А., Биккулова Н.Н., Акманова Г.Р., Курбангулов А.Р., Касьянов Д.А.
СТРУКТУРА И ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ШТЮТЦИТА И ГЕССИТА…….…… 104
Дуранова А.В., Симакова С.С.
ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМЫ И РАЗМЕРА АГЛОМЕРАТОВ ТЕХНИЧЕСКОГО УГЛЕРОДА В ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТАХ……..…….. 106
Еленская Н.В., Затонская В.М., Ташкинов М.А.
МОДЕЛИРОВАНИЕ УПРУГОВЯЗКОПЛАСТИЧЕСКОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ АНИЗОТРОПНЫХ ТПМП-СКАФФОЛДОВ ДЛЯ ЗАМЕЩЕНИЯ ПОВРЕЖДЕННОЙ КОСТНОЙ ТКАНИ……..... 108
Ермилов Н.В., Биккулова Н.Н., Акманова Г.Р., Курбангулов А.Р.
ИЗУЧЕНИЕ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ И ПОДВИЖНОСТИ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК СУЛЬФИДА СВИНЦА С ЛИГАНДАМИ…….…. 109

Ефремов К.В., Баданов Е.Ч., Бакшпнский Р.Ю., Шеховцов В.В.
МОРФОЛОГИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ АГЛОМЕРИРОВАННЫХ ПОРОШКОВ НА ОСНОВЕ ТАРНОГО СТЕКЛА, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ РАСПЫЛИТЕЛЬНОЙ СУШКИ……. 111
Загитов Р.Р., Ситдиков О.Ш., Автократова Е.В., Латыпова О.Э., Маркушев М.В.
ВЛИЯНИЕ ВСЕСТОРОННЕЙ ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ КОВКИ С ПОНИЖЕНИЕМ ТЕМПЕРАТУРЫ НА СТРУКТУРУ, МЕХАНИЧЕСКОЕ И КОРРОЗИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА 1570С……..... 113
Загуренко Ю.Т., Ширяев Д.С., Полухин И.С., Колодезный Е.С.
ИССЛЕДОВАНИЕ ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ РЕЗОНАНСНЫХ СВОЙСТВ ОРТОРОМБИЧЕСКОЙ ФАЗЫ ОКСИДА ГАЛЛИЯ……..…….. 115
Зайнуллин Р.И., Мухтаров Ш.Х., Шахов Р.В., Ганеев А.А., Имаев В.М.
ВЛИЯНИЕ ГОРЯЧЕЙ ДЕФОРМАЦИИ НА ФОРМИРОВАНИЕ МЕЛКОЗЕРНИСТОЙ СТРУКТУРЫ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГРАНУЛИРУЕМОГО ЖАРОПРОЧНОГО НИКЕЛЕВОГО СПЛАВА ВВ751П……... 117
Зайнуллин Р.И., Мухтаров Ш.Х., Шахов Р.В., Ганеев А.А., Имаев В.М.
ВЛИЯНИЕ ДЕФОРМАЦИОННО-ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА МИКРОСТРУКТУРУ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГРАНУЛЬНОГО НИКЕЛЕВОГО СПЛАВА ВВ751П……..... 119
Зайцев О.В., Гареев Т.И., Малыхин Д.Г., Сорокин Д.В., Смовж Д.В.
СИНТЕЗ ПЛЁНОК ДИОКСИДА ТИТАНА УВЕЛИЧЕННОЙ ПОРИСТОСТИ И ИХ ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА……..... 120
Затонская В.М., Еленская Н.В., Ташкинов М.А.
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ АРХИТЕКТУРЫ ТПМП-СКАФФОЛДОВ НА МЕХАНИЧЕСКИЙ ОТКЛИК СИСТЕМЫ «КОСТЬ-ИМПЛАНТАТ»……...…. 123
Зыкова А.П., Воронцов А.В., Панфилов А.О., Тарасов С.Ю.
ВЛИЯНИЕ ТЕРМОЦИКЛИРОВАНИЯ В УСЛОВИЯХ НЕСТАЦИОНАРНОЙ МЕТАЛЛУРГИИ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОГО АДДИТИВНОГО ПРОИЗВОДСТВА НА ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУРНО-ФАЗОВОГО СОСТОЯНИЯ Ti4Al3V…… 124
Ибрагимова Х.С.
КИНЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ТЕРМИЧЕСКОЙ ДЕСТРУКЦИИ НАНОКОМПОЗИТОВ PP/SiO2 МЕТОДОМ КОУТСА–РЕДФЕРНА…….. 126
Имаев В.М., Трофимов Д.М., Ганеев А.А., Тимиряев Р.Р., Зайнуллин Р.И., Шагиев М.Р., Мулюков Р.Р.
ВЛИЯНИЕ КОМПЛЕКСНОГО ЛЕГИРОВАНИЯ, ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ КОВКИ И ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА МИКРОСТРУКТУРУ, МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И СОПРОТИВЛЕНИЕ ОКИСЛЕНИЮ ИНТЕРМЕТАЛЛИДНЫХ ОРТО-СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ Ti2AlNb……. 127
Исхакова Э.И., Чуракова А.А.
АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ БИОЛОГИЧЕСКИХ СРЕД НА КОРРОЗИОННУЮ СТОЙКОСТЬ СПЛАВА TINI……. 130
Кабирова Д.Б., Хайретдинов Н.Ф., Фазлыахметов Р.Ф., Имаев М.Ф.
СРАВНЕНИЕ СВАРКИ И ОБРАБОТКИ ТРЕНИЕМ С ПЕРЕМЕШИВАНИЕМ АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА АМГ3……..…. 132
Каманцев А.П., Калашников В.С., Несолёнов А.В., Кузнецов А.С., Ковалёв О.Е., Ныркov Н.Ю., Сафонов Р.А., Головчан А.В., Мусабиров И.И.
МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЕ И ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА Ni37Co13Mn35Ti15 В ВИДЕ СЛИТКОВ И БЫСТРОЗАКАЛЁННЫХ ЛЕНТ……..……... 135
Канакин В.С., Смирнов А.С., Швейкин В.П.
ВЛИЯНИЕ ЧАСТИЦ КАРБИДА ТИТАНА НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА

МЕТАЛЛОМАТРИЧНЫХ КОМПОЗИТОВ СИСТЕМ В95-TiC И АМг5-TiC……. 137
Касьянов Д.А., Биккулова Н.Н., Акманова Г.Р., Курбангулов А.Р., Долгий Д.А.
СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ СУПЕРИОННЫХ ПРОВОДНИКОВ……..… 140
Ким А.В., Абышова А.Б., Литовко А.В.
ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ДУГОВОЙ ПЛАЗМЫ И ГРАНУЛОМЕТРИИ ИСХОДНЫХ КОМПОНЕНТОВ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА СИНТЕЗИРОВАННЫХ МУЛЛИТОВЫХ МАТЕРИАЛОВ……..…….. 142
Ким А.В., Полехина Н.А., Аккузин С.А., Литовченко И.Ю.
СТРУКТУРА И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СТАЛИ 07Х20Г11АН6 ПОСЛЕ ХОЛОДНОЙ ПРОКАТКИ НА 60 % И СТАРЕНИЯ ПРИ 700 ℃……..... 144
Кирилюк К.К., Мусабиров И.И., Нагимов М.И.
АНАЛИЗ РЕЖИМОВ КОМПАКТИРОВАНИЯ МЕТАЛЛОМАТРИЧНОГО КОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ СПЛАВА DyAl2……..……... 145
Клевцов Г.В., Валиев Р.З., Клевцова Н.А.
ВЛИЯНИЕ ЛОКАЛЬНОГО НАПРЯЖЕННОГО СОСТОЯНИЯ НА МЕХАНИЗМ РАЗРУШЕНИЯ КЗ И УМЗ МАТЕРИАЛОВ С ОЦК, ГЦК И ГПУ РЕШЕТКОЙ ПРИ ОДНОКРАТНЫХ ВИДАХ НАГРУЖЕНИЯ……. 147
Клепов Д.Н., Арышенский Е.В., Ким С.О., Арышенский М.В., Ерисов Я.А.
ЗАВИСИМОСТЬ УСТОЙЧИВОСТИ КУБИЧЕСКОЙ ТЕКСТУРЫ ОТ ТЕМПЕРАТУРНОГО РЕЖИМА ГОРЯЧЕЙ ПРОКАТКИ……..... 150
Клепова А.А., Арышенский Е.В., Малкин К.А., Коновалов С.В.
ВЛИЯНИЕ ГОМОГЕНИЗАЦИОННОГО ОТЖИГА НА ТЕРМОСТАБИЛЬНОСТЬ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СПЛАВОВ АЛТЭК СИСТЕМЫ AL-CU-MN……...…….… 152
Климашина Е.С., Середенко П.Е., Пупанова А.К., Рассолова Ю.Р., Мурашко А.М., Путляев В.И.
ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ ПОВЕРХНОСТИ БИОРЕЗОРБИРУЕМЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ РЕКОНСТРУКЦИИ КОСТНОЙ ТКАНИ НА ОСНОВЕ ФОСФАТОВ МАГНИЯ ГИДРОЛИТИЧЕСКОЙ КОНВЕРСИЕЙ В МОДЕЛЬНЫХ РАСТВОРАХ……..... 154
Мурашко А.М., Рассолова Ю.Р., Исаева В.Е., Филиппов Я.Ю., Климашина Е.С., Путляев В.И.
ОПТИМИЗАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ ЗОЛЬ-ГЕЛЬ СИНТЕЗА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ВЫСОКОПЛОТНОЙ МАГНИЙФОСФАТНОЙ КЕРАМИКИ…….……...…...… 156
Ныркова Н.Ю., Головчан А.В., Ковалёв О.Е., Грибанов И.Ф., Каманцев А.П., Митюк В.И., Бутвина Л.Н.
МАГНИТНЫЕ И МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ Mn_1TiAs….. 157
Козлова Л.О., Козерожец И.В., Иони Ю.В., Васильев М.Г.
МОДИФИЦИРОВАННЫЙ СИНТЕЗ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ АЛЮМИНАТОВ НА ОСНОВЕ ЩЕЛОЧНОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ (Ca2+, Sr2+, Ba2+)…….…….. 159
Колпаков А.И., Кузьменко А.П., Паньков А.Д.
ВЛИЯНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ В АТМОСФЕРЕ АРГОНА НА МОРФОЛОГИЮ ПЛЕНОК Bi2Te2.7Se0.3……...…….. 161
Кондратьев Н.С., Романов К.А., Гладких П.А., Подседерцев А.Н., Соломатин Л.А.
МНОГОУРОВНЕВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ ШЕРОХОВАТОСТИ И ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ В ОБРАЗЦАХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ……..… 164

Корзникова Г.Ф.
ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРЫ И ФАЗОВОГО СОСТАВА НА ДЕФОРМАЦИОННУЮ СПОСОБНОСТЬ МАГНИТОТВЕРДЫХ СПЛАВОВ СИСТЕМЫ Fe-Cr-Co……. 166
Корольков О.Е., Столяров В.В.
ПРИМЕНЕНИЕ ЭЛЕКТРОПЛАСТИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА ДЛЯ ФОРМООБРАЗОВАНИЯ ПОЛУФАБРИКАТОВ ТИТАНОВЫХ ИМПЛАНТАТОВ.. 167
Косьянов Д.Ю., Ворновских А.А., Завьялов А.П., Рыбаков К.И., Образцов А.А., Балабанов С.С., Ли Дж.
МИКРОВОЛНОВОЕ РЕАКЦИОННОЕ СПЕКАНИЕ КЕРАМИЧЕСКИХ ЛЮМИНОФОРОВ Al2O3–Ce:YAG ДЛЯ СВЕРХЪЯРКОГО ТВЕРДОТЕЛЬНОГО ОСВЕЩЕНИЯ……..... 170
Кочкин А.С., Старостенков М.Д., Теников К.А.
ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКОЙ ЭНЕРГИИ МЕЖДУ ПОДРЕШЁТКАМИ Pt3Al ПРИ ВОЗБУЖДЕНИИ В ЗАПРЕЩЁННОЙ ЗОНЕ ФОНОННОГО СПЕКТРА……..…. 171
Крылова К.А., Рожнова Е.А., Шавелкина М.Б., Баимова Ю.А.
СИНТЕЗ МЕДЬ/ГРАФЕНОВЫХ ЧАСТИЦ И ВОДОРОДНЫХ ДОМЕНОВ В ПЛАЗМЕННОЙ СТРУЕ: МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА……..……. 173
Кулакова Е.А., Грешняков В.А.
ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ УГЛЕРОДНЫХ СВИТКООБРАЗНЫХ НАНОСТРУКТУР……..... 174
Курбатова Я.Е., Смовж Д.В.
ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА НА МОРФОЛОГИЮ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ОКСИДА ГРАФЕНА, ПОЛУЧЕННОГО ИЗ ЛУКОВИЧНОГО УГЛЕРОДНОГО СЫРЬЯ……..... 176
Курцевич А.Е., Курцевич Е.А., Гадиров Р.М.
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МЕМБРАН ПОРИСТОГО АНОДНОГО ОКСИДА АЛЮМИНИЯ С ПЕРЕМЕННЫМ ДИАМЕТРОМ ПОР…….…….. 179
Латыпова О.Э., Ситдиков О.Ш., Автократова Е.В., Маркушев М.В.
ВЛИЯНИЕ ВСЕСТОРОННЕЙ ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ КОВКИ С ПОНИЖЕНИЕМ ТЕМПЕРАТУРЫ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА 1570С…… 182
Лебединская А.Р.
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КИСЛОРОДНЫХ ВАКАНСИЙ В НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКИХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ НА ОСНОВЕ МАГНОНИОБАТА СВИНЦА……..…. 185
Линдеров М.Л., Мерсон Д.Л.
К ВОПРОСУ О СТАНДАРТАХ КОРРОЗИОННО-УСТАЛОСТНЫХ ИСПЫТАНИЙ ДЛЯ БИОРЕЗОРБИРУЕМЫХ МАТЕРИАЛОВ……..... 187
Литовченко И.Ю., Полехина Н.А., Аккузин С.А., Осипова В.В., Ким А.В., Тимошов И.С., Чернов В.М.
ВЛИЯНИЕ ЭЛЕМЕНТНОГО СОСТАВА И ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКИХ ОБРАБОТОК НА ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В МАЛОАКТИВИРУЕМОЙ АУСТЕНИТНОЙ СТАЛИ В УСЛОВИЯХ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СТАРЕНИЯ……..... 188
Лутфуллин Р.Я., Кулясова О.Б., Мухаметрахимов М.Х., Руденко О.А., Саркеева А.А.
ТВЕРДОФАЗНАЯ СВАРКА ТИТАНОВОГО СПЛАВА ВТ14 С МАГНИЕВЫМ СПЛАВОМ AZ31……..…… 189

Лушникова Л.Л., Красницкий С.А., Гуткин М.Ю.
КОНЕЧНО-ЭЛЕМЕНТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТАЦИОНАРНОГО РОСТА ПОВЕРХНОСТНОЙ ТРЕЩИНЫ……..... 191
Лычагин Д.В., Лычагина Л.Л.
СУБСТРУКТУРНОЕ УПРОЧНЕНИЕ ПРИ ТРЕНИИ В ГЦК МОНОКРИСТАЛЛАХ.. 194
Сафиуллин Р.В., Малышева С.П., Алетдинов А.Ф.
МИКРОСТРУКТУРА И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СВАРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ИЗ ТИТАНОВЫХ СПЛАВОВ, ПОЛУЧЕННЫХ ЛАЗЕРНОЙ СВАРКОЙ……..... 197
Мамалат А.И., Мендагалиев Р.В., Алымов Н.Р., Земляков Е.В., Климова-Корсмик О.Г.
ВЛИЯНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА СТРУКТУРУ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА 08Х18Н10Т–WC, ПОЛУЧЕННОГО МЕТОДОМ ПРЯМОГО ЛАЗЕРНОГО ВЫРАЩИВАНИЯ……... 200
Мамедова Э.Р., Стукалин Д.О., Дун Ю., Александров И.В.
ВЛИЯНИЕ НАВОДОРОЖИВАНИЯ НА ФАЗОВЫЙ СОСТАВ, МИКРОСТРУКТУРУ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СПЛАВА Ti-1023……... 203
Абдуллин И.Ш., Мастюков К.Ш., Миронов С.В.
ВЧ-ПЛАЗМЕННАЯ ПОЛИРОВКА, УПРОЧНЕНИЕ, АЗОТИРОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ДЕТАЛЕЙ И ИНСТРУМЕНТОВ……..... 205
Мигранов М.Ш., Козочкин М.П., Мигранов А.М.
ДИАГНОСТИРОВАНИЕ СВОЙСТВ СВЕРХТВЕРДЫХ МАТЕРИАЛОВ……..….. 208
Мигранов М.Ш., Мигранов А.М.
ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫЕ ИЗНОСОСТОЙКИЕ ПОКРЫТИЯ ДЛЯ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ОБРАБОТКИ РЕЗАНИЕМ……..……... 211
Минюкевич Д.А., Галиева Э.В., Валитов В.А.
ИССЛЕДОВАНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ И МИКРОТВЕРДОСТИ ТОНКОЛИСТОВЫХ ЗАГОТОВОК ИЗ НИКЕЛЕВОГО СПЛАВА ЭК61, ПОЛУЧЕННЫХ ЛАЗЕРНОЙ СВАРКОЙ ……..……... 214
Миргаязов Р.Э., Бикмухаметова М.А.
ИССЛЕДОВАНИЕ ДЕФЕКТА СВАРНОГО ШВА СТАЛИ А671 GR. CC 60…….….. 215
Михайловская А.В., Яковцева О.А., Марданшина Т.М., Мочуговский А.Г.
ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ АЛЮМИНИЯ С ПОВЫШЕННЫМ СОДЕРЖАНИЕМ Mn……..…... 217
Мосягин И.А., Ольшанская Т.В.
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ЖАРОПРОЧНОГО НИКЕЛЕВОГО СПЛАВА, ПОЛУЧЕННОГО ПЛАЗМЕННОЙ ПОРОШКОВОЙ НАПЛАВКОЙ, ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ВИДАХ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ……..…… 219
Миронов Р.А., Мурзаев Р.Т.
ОЦЕНКА КОЭФФИЦИЕНТА ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ КОМПОЗИТНОГО МАТЕРИАЛА МЕДЬ-ФУЛЛЕРЕН C_{60} МЕТОДОМ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ……..……...…… 222
Мурзинова М.А., Шаяхметова Э.Р., Назаров А.А.
ВЛИЯНИЕ ЭНЕРГИИ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ СВАРКИ НА ИЗМЕНЕНИЕ ПРОЧНОСТИ И СТРУКТУРЫ ОБРАЗЦОВ МЕДИ……..……... 223
Мурзакаев А.М.
СТРУКТУРНЫЕ И ФАЗОВЫЕ ОСОБЕННОСТИ НАНОЧАСТИЦ ZrO2, ПОЛУЧЕННЫЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ВЗРЫВОМ ПРОВОЛОКИ……..…… 224

Мусабиров И.И., Сафаров И.М., Галеев Р.М., Гайфуллин Р.Ю., Кирилюк К.К., Калашников В.С., Несоленов А.В., Коледов В.В., Таскаев С.В., Гаджиев А.Б., Алиев А.М., Мулюков Р.Р.
ФОРМИРОВАНИЕ БИМОДАЛЬНОЙ МИКРОСТРУКТУРЫ В СПЛАВАХ СИСТЕМЫ Ni-Mn-Ga…… 227
Муслов С.А., Плаксин С.А., Шадрин В.В., Сухочев П.Ю., Платунова В.А.
ПЛОТНОСТЬ СШИВКИ СИЛИКОНОВ И ПАРАМЕТРЫ ГИПЕРУПРУГИХ МОДЕЛЕЙ……..……... 228
Мухаметрахимов М.Х., Лутфуллин Р.Я.
ВЛИЯНИЕ ВАКУУМНОГО ОТЖИГА НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА СВАРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ИЗ ТИТАНОВОГО СПЛАВА ВТ6……. 231
Мухтаров Ш.Х., Зайнуллин Р.И., Шахов Р.В., Ганеев А.А., Имаев В.М.
ГОРЯЧАЯ ДЕФОРМАЦИЯ ГРАНУЛИРУЕМЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ: МИКРОСТРУКТУРА И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА……..…… 234
Мушников А.Н., Березовский А.В., Веселова В.Е., Соболева Н.Н.
МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА Fe-Cr-Mn-Ni-Mo-Cu-N СТАЛЕЙ, ПОЛУЧЕННЫХ ЭЛЕКТРОДУГОВЫМ ВЫРАЩИВАНИЕМ ИЗ РАЗРАБОТАННЫХ ПОРОШКОВЫХ ПРОВОЛОК…… 235
Назарова Т.И., Валиахметов О.Р., Имаев Р.М., Мулюков Р.Р.
НЕЙТРОННО-ПОГЛОЩАЮЩИЙ СПЛАВ НА ОСНОВЕ НИКЕЛЯ: ПОЛУЧЕНИЕ, СТРУКТУРА, СВОЙСТВА…….. 236
Нарсеев А.С., Захаров П.В., Ганин С.В.
МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПЕНОАЛЮМИНИЯ ПРИ ОДНООСНОЙ ДЕФОРМАЦИИ……..... 239
Нарыкова М.В., Бетехтин В.И., Колобов Ю.Р., Манохин С.С., Токмачева-Колобова А.Ю., Кадомцев А.Г., Амосова О.В.
МИКРОНАПРЯЖЕНИЯ И УСТАЛОСТНАЯ ДОЛГОВЕЧНОСТЬ СУБ- И МИКРОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ТИТАНА: ДВОЙСТВЕННАЯ РОЛЬ ДЕФЕКТНОЙ СТРУКТУРЫ……... 242
Насырбаев А., Никитин Д.С., Шаненков И.И., Шаненкова Ю.Л.
СИНТЕЗ НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКИХ НАНОКАРБИДОВ ВОЛЬФРАМА И МОЛИБДЕНА В ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ПЛАЗМЕ ДУГОВОГО РАЗРЯДА…… 245
Невский С.А., Бащенко Л.П., Громов В.Е., Михайлов Д.Д.
МЕХАНИЗМЫ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ ЗАКАЛЕННОЙ ПЕРЛИТНОЙ СТАЛИ ЗАЭВТЕКТОИДНОГО СОСТАВА ПРИ РАСТЯЖЕНИИ И СЖАТИИ……...……. 247
Николаев А.Н., Савченко Н.Л., Дюскина Д.А., Копылова А.Д.
ОПТИМИЗАЦИЯ СОСТАВА И ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ ТРЕНИЯ КОМПОЗИТА КАРБИД КРЕМНИЯ - АЛМАЗ ДЛЯ БЕССМАЗОЧНЫХ УЗЛОВ ТРЕНИЯ……..... 250
Нифонтов А.С., Астафурова Е.Г.
ЗАКОНОМЕРНОСТИ ДЕСОРБЦИИ ВОДОРОДА ИЗ МНОГОКОМПОНЕНТНОГО (ВЫСОКОЭНТРОПИЙНОГО) СПЛАВА CoCrFeMnNi, ЛЕГИРОВАННОГО АЗОТОМ И УГЛЕРОДОМ……. 252
Носова Н.М., Селезнева Н.В.
ЭВОЛЮЦИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ И ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ В РЯДУ СЛОИСТЫХ СОЕДИНЕНИЙ TiSe2 - Fe0.9TiSe2……. 253
Осипова В.В., Полехина Н.А., Литовченко И.Ю.
ВЛИЯНИЕ СТАРЕНИЯ ПРИ 700 °С НА ОСОБЕННОСТИ МИКРОСТРУКТУРЫ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФЕРРИТНО-МАРТЕНСИТНОЙ СТАЛИ ЭП-823…… 255

Пасечник К.А., Власов А.Ю., Мирошниченко А.А., Обверткин И.В.
АНАЛИЗ СТРУКТУРНОЙ РЕЛАКСАЦИИ В ДИНАМИЧЕСКИ-ГЕТЕРОГЕННЫХ ЭПОКСИДНЫХ ПОЛИМЕРАХ……..... 256
Первухин К.Е., Филиппов А.А.
МЕХАНИЧЕСКИЕ ИСПЫТАНИЯ УГЛЕПЛАСТИКОВЫХ ЭЛЕМЕНТОВ КОНСТРУКЦИИ ПРОТЕЗОВ СТОП……..…….... 259
Перельмутер М.Н.
МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАЛЕЧИВАНИЯ ТРЕЩИН ……...…… 261
Пермякова И.Е.
РАЗРАБОТКА АМОРФНО-КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ КОМПОЗИТОВ С УСОВЕРШЕНСТВОВАННЫМИ СВОЙСТВАМИ НА БАЗЕ ЛЕНТОЧНЫХ АМОРФНЫХ СПЛАВОВ……..…….. 264
Петров Д.А., Гуткин М.Ю., Колесникова А.Л., Романов А.Е.
ПРЯМОЛИНЕЙНЫЕ ДИСЛОКАЦИИ НЕСООТВЕТСТВИЯ В СЕГМЕНТИРОВАННЫХ НАНОПРОВОЛОКАХ……..…….. 265
Петрова С.С., Квашнин Д.Г.
МОДЕЛИРОВАНИЕ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ И ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК, ЗАПОЛНЕННЫХ СТЕРЖНЕВЫМИ СТРУКТУРАМИ ТЕЛЛУРА……. 268
Пирогова Ю.В., Еленская Н.В., Затонская В.М., Ташкинов М.А.
ПРОЕКТИРОВАНИЕ ТПМП-СТРУКТУР С ЗАДАННЫМ НА ОСНОВЕ РЕФЕРЕНТНОЙ МОДЕЛИ МЕХАНИЧЕСКИМ ОТКЛИКОМ……... 270
Подгорбунская П.О., Волков А.Ю.
ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ЭКВИАТОМНОГО СПЛАВА Cu-50ат.%Au ПРИ УПОРЯДОЧЕНИИ В ПОЛЕ ВНЕШНИХ СИЛ……..... 273
Подгорбунская П.О., Новикова О.С., Краев М.Ю., Волков А.Ю.
ИЗМЕНЕНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ СПЛАВА 20Au-15Pt-15Pd-50Cu (ат.%) В ХОДЕ ОТЖИГА ПРИ 200-600 °С ……... 275
Поленок М.В., Хафизова Э.Д.
СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ, МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И КОРРОЗИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ СПЛАВОВ Zn-Ag-Cu ПОСЛЕ РКУП……..……. 276
Полетаев Г.М.
МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ НИКЕЛЯ С КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ, АМОРФНОЙ И НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРАМИ: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ…….. 278
Полехина Н.А., Литовченко И.Ю.
ЭВОЛЮЦИЯ МИКРОСТРУКТУРЫ И МИКРОТВЕРДОСТИ МАЛОАКТИВИРУЕМОЙ ФЕРРИТНО-МАРТЕНСИТНОЙ СТАЛИ ЭК-181 ПОСЛЕ КРУЧЕНИЯ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ……. 281
Полякова П.В., Баимова Ю.А.
АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ ТОЛЩИНЫ ДИАМАНОВ И БОРНИТРАНОВ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА: МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА……..……..….. 282
Попов Д.Н., Прокопьев А.Р.
ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ БЫСТРОГО ДЖОУЛЕВА НАГРЕВА НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА АЭРОГЕЛЕЙ ОКСИДА ГРАФЕНА……..... 285
Почетуха В.В., Романов Д.А., Громов В.Е., Денисенко Е.С.
ПРЕДПОСЫЛКИ ВОЗНИКНОВЕНИЯ ТЕХНОЛОГИИ ЭЛЕКТРОННО-ИОННО-ПЛАЗМЕННОГО НАПЫЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОЭРОЗИОННОСТОЙКИХ ПОКРЫТИЙ БЕЛЫЙ ЭЛЕКТРОКОРУНД – СЕРЕБРО……. 287
Пышминцев И.Ю.
АКТУАЛЬНЫЕ ЗАДАЧИ ПРОИЗВОДСТВА СТАЛЬНЫХ ТРУБ……..... 288

Разумовский Е.С.
ВЛИЯНИЕ ГРАФИТАЦИИ НА СТРУКТУРУ И ТОПОЛОГИЮ ПОР В УГЛЕРОД-УГЛЕРОДНОМ КОМПОЗИЦИОННОМ МАТЕРИАЛЕ…….. 290
Рогачев А.С.
ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫЙ СИНТЕЗ И КОНСОЛИДАЦИЯ ПЕРСПЕКТИВНЫХ КЕРАМИКО-МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПОРОШКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ……. 292
Рожнова Е.А., Баимова Ю.А.
ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ СМЯТЫХ ЧЕШУЕК ГРАФЕНА И НАНОЧАСТИЦ МЕТАЛЛОВ……. 293
Романов К.А., Кондратьев Н.С., Швейкин А.И.
МНОГОУРОВНЕВОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ УЧАСТКА МЕДНОГО ПРОВОДНИКА МОРСКОГО КАБЕЛЯ С УЛУЧШЕННЫМИ ЭКСПЛУАТАЦИОННЫМИ СВОЙСТВАМИ……..…… 294
Савенков Г.Г., Смаковский М.С., Атрошенко С.А., Итин Е.А., Харанжевский Е.В.
ДИНАМИЧЕСКАЯ ПРОЧНОСТЬ И МИКРОСТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ДЕФОРМИРОВАНИЯ ПРЕГРАДЫ ИЗ АЛЮМИНИЕВОЙ БРОНЗЫ С КЕРАМИЧЕСКИМ ПОКРЫТИЕМ……..…….. 297
Коптяев Е.В., Смаковский М.С., Савенков Г.Г.
МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И СТРУКТУРА МЕЛКОЗЕРНИСТОЙ НЕРЖАВЕЮЩЕЙ СТАЛИ ПРИ ДИНАМИЧЕСКОМ НАГРУЖЕНИИ……..... 300
Самигуллина А.И., Юлдашева А. Р., Шарафуллин И.Ф., Диеп Н.Т.
ПОВЕРХНОСТНЫЕ СВОЙСТВА И СПИНОВЫЕ ВОЛНЫ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ/ФЕРРОМАГНИТНЫХ СВЕРХРЕШЕТОК……... 302
Саркеева А.А.
АНИЗОТРОПНОЕ ПОВЕДЕНИЕ СЛОИСТОГО МАТЕРИАЛА ИЗ ТИТАНОВОГО СПЛАВА ВТ20 ПРИ УДАРНОМ НАГРУЖЕНИИ……... 303
Сафиуллин Р.В., Сафиуллин А.Р.
МНОГОСЛОЙНЫЕ ЯЧЕИСТЫЕ КОНСТРУКЦИИ: МЕТОДОЛОГИЯ ПРОЦЕССА СВЕРХПЛАСТИЧЕСКОЙ ФОРМОВКИ И ДИФФУЗИОННОЙ СВАРКИ……..….... 304
Сдобняков Н.Ю., Савина К.Г., Серов С.В., Митинев Е.С., Колосов А.Ю., Соколов Д.Н., Богданов С.С.
КАК ВАРИАБЕЛЬНОСТЬ НАЧАЛЬНЫХ КОНФИГУРАЦИЙ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ ВЛИЯЕТ НА СТРУКТУРНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ?..... 307
Сидоренко А.О., Дмитриева А.В., Блохин А.А., Жеребцов С.В.
УПРАВЛЕНИЕ СТРУКТУРОЙ И СВОЙСТВАМИ СТАЛИ 08Х18Н10Т ПРИ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНОМ ПРЯМОМ ЛАЗЕРНОМ ВЫРАЩИВАНИИ КРУПНОГАБАРИТНЫХ ИЗДЕЛИЙ……..… 308
Ситдиков В.Д., Малинин А.В.
ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ РКУП НА ЭВОЛЮЦИЮ НАНОРАЗМЕРНЫХ КАРБИДОВ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МАЛОУГЛЕРОДИСТОЙ СТАЛИ 10……..…… 311
Ситдиков О.Ш., Латыпова О.Э.
СТАБИЛИЗАЦИЯ УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОЙ СТРУКТУРЫ В СПЛАВЕ АА2219 ПРИ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОМ РАВНОКАНАЛЬНОМ УГЛОВОМ ПРЕССОВАНИИ ДО ЭКСТРЕМАЛЬНО ВЫСОКОЙ НАКОПЛЕННОЙ ДЕФОРМАЦИИ……..….. 312
Скорынина П.А., Макаров А.В., Кузнецов В.П., Скоробогатов А.С., Юровских А.С.
СТРУКТУРА И МИКРОМЕХАНИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ АУСТЕНИТНОЙ CR-NI СТАЛИ, ПОДВЕРГНУТОЙ ОБРАБОТКАМ СКОЛЬЗЯЩИМ

ИНДЕНТОРОМ ИЗ СИНТЕТИЧЕСКОГО АЛМАЗА…….. 314
Слепченков М.М., Шунаев В.В., Барков П.В., Куксин А.В., Герасименко А.Ю., Глухова О.Е.
ИНТЕРФЕЙСЫ ГИБРИДНАЯ УГЛЕРОДНАЯ ПЛЕНКА/ОКСИД МЕТАЛЛА: ОСОБЕННОСТИ СТРОЕНИЯ И ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА……..…….. 315
Смирнов А.С., Смирнова Е.О., Канакин В.С.
ФОРМИРОВАНИЕ МЕЖФАЗНОГО СЛОЯ В СТЕКЛОПЛАСТИКЕ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ДАВЛЕНИЯХ ОТВЕРЖДЕНИЯ……...……. 318
Смирнов С.В., Швейкин В.П.
ПЕРСПЕКТИВНЫЕ РАЗРАБОТКИ ИМАШ УрО РАН В ОБЛАСТИ КОНСТРУИРОВАНИЯ МАТЕРИАЛОВ И ТЕХНОЛОГИЙ……..……. 320
Соболева Н.Н., Давыдова Н.А., Крылова С.Е., Скорынина П.А., Сирош В.А., Макаров А.В.
ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОКРЫТИЯ Ni-6Al-5Mo + WC, СФОРМИРОВАННОГО ЛАЗЕРНОЙ НАПЛАВКОЙ……..……... 322
Сташков Д.В., Ольшанская Т.В.
ВЛИЯНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА МАКРО- И МИКРОСТРУКТУРУ ИЗДЕЛИЙ ИЗ ВЫСОКОЛЕГИРОВАННОЙ ХРОМИСТОЙ СТАЛИ 20Х13, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ЛАЗЕРНО-ПРОВОЛОЧНОЙ НАПЛАВКИ…….. 323
Столяров В.В.
МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ЭЛЕКТРОПЛАСТИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА……..……... 326
Столяров В.В.
ЭЛЕКТРОПЛАСТИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ И СКВАЖНОСТЬ ИМПУЛЬСНОГО ТОКА……..…… 328
Султанов В.И., Атражев В.В., Дмитриев Д.В.
СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ПЕРЕХОД В СОПОЛИМЕРАХ ВДФ: ТЕОРИЯ И МОДЕЛИРОВАНИЕ……..…... 331
Сундеев Р.В., Шалимова А.В., Рогачев С.О.
ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ АМОРФНО-НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ КОМПОЗИТОВ В УСЛОВИЯХ ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ ВНЕШНИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ 334
Тагирова А.А., Валитов В.А., Галиева Э.В.
МИКРОСТРУКТУРА И ПРОЧНОСТЬ ТВЕРДОФАЗНОГО СОЕДИНЕНИЯ ИЗ ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ ЭК79 И ЭП741НП…… 335
Тимиряев Р.Р., Имаев Р.М.
ВЛИЯНИЕ ЛЕГИРОВАНИЯ V И C НА СТРУКТУРУ И ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА Fe-Ni ИНВАРНОГО СПЛАВА……..……. 336
Трифонов В.Г.
ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ ШТАМПОВКИ ПОРШНЕЙ ДВИГАТЕЛЕЙ ВНУТРЕННЕГО СГОРАНИЯ……... 339
Трофимов Д.М., Имаев В.М., Имаев Р.М.
ВЛИЯНИЕ ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ КОВКИ И ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА МИКРОСТРУКТУРУ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НОВОГО ИНТЕРМЕТАЛЛИДНОГО СПЛАВА Ti-44.5Al-7(Nb,Zr,Ta,Hf)-0.1B (ат.%)……... 341
Тувалев И.И., Мурзаев Р.Т.
МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЯЧЕИСТОГО КОМПОЗИТНОГО МАТЕРИАЛА ГРАФЕНОВЫЙ АЭРОГЕЛЬ/МЕДЬ……..... 342
Тураева З.С., Яковцева О.А., Котов А.Д., Михайловская А.В.
ВЛИЯНИЕ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА ЗЕРЕННУЮ СТРУКТУРУ И СВЕРХПЛАСТИЧНОСТЬ СПЛАВА Al-Mg-Zn-Cu-Cr-Zr С МИКРОДОБАВКОЙ СКАНДИЯ…….. 345

Хайретдинов Н.Ф., Кабирова Д.Б., Хасанов Б.М., Имаев М.Ф.
ВЛИЯНИЕ МНОГОПРОХОДНОЙ ОБРАБОТКИ ТРЕНИЕМ С ПЕРЕМЕШИВАНИЕМ НА МИКРОСТРУКТУРУ СПЛАВА АА6063 И КОМПОЗИТА АА6063/TiO2…….. 347
Хисамов Р.Х., Андрианова Н.Н., Борисов А.М., Овчинников М.А., Мулюков Р.Р.
ПОВЫШЕНИЕ ЭРОЗИОННОЙ СТОЙКОСТИ ВОЛЬФРАМА К ВОЗДЕЙСТВИЮ ИОНОВ ГЕЛИЯ ЗА СЧЕТ ФОРМИРОВАНИЯ В НЕМ УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОЙ СТРУКТУРЫ И КОНУСООБРАЗНОГО РЕЛЬЕФА ПОВЕРХНОСТИ……... 350
Худододова Г.Д., Исламгалиев Р.К., Валиев Р.З.
ВЛИЯНИЕ КОМБИНИРОВАННОГО МЕТОДА РКУП+ЭКСТРУЗИЯ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА БИОМЕДИЦИНСКОГО СПЛАВА Mg-Zn-Ca……. 353
Царева И.А., Мокрушин В.В., Канунов А.Е., Забродина О.Ю., Орехов А.В.
АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ И ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА ПОВЕРХНОСТИ ПЕРЕЗАРЯДНЫХ ФОЛЬГ, ПОДВЕРГНУТЫХ ВОЗДЕЙСТВИЮ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА……..…... 355
Черкасова Т.С., Гладковский С.В., Саврай Р.А., Петрова С.В., Протасов А.В.
СТРУКТУРА, ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ И ТРИБОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА УПРОЧНЕННЫХ КАРБИДНЫМИ И ОКСИДНЫМИ ЧАСТИЦАМИ АЛЮМОМАТРИЧНЫХ КОМПОЗИТОВ…….. 357
Чуракова А.А., Исхакова Э.И., Воробьев Е.В.
ИЗМЕНЕНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ В СПЛАВАХ TiNi ПРИ МНОГОКРАТНЫХ МАРТЕНСИТНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЯХ…….…… 360
Шавелкина М.Б., Рожнова Е.А., Крылова К.А., Баимова Ю.А., Иванов П.П.
ОДНОСТАДИЙНЫЙ ПЛАЗМОХИМИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ ГИДРИРОВАННОГО ГРАФЕНА: ЭКСПЕРИМЕНТ И МОДЕЛИРОВАНИЕ…….……... 362
Шамарин Н.Н., Филиппов А.В.
СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ЭФФЕКТИВНОСТИ ТЕПЛОВОГО, ДЕФОРМАЦИОННОГО И УЛЬТРАЗВУКОВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА ТИТАНОВЫХ СПЛАВОВ ОТ4-1 И ВТ6 ПРИ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОМ АДДИТИВНОМ ПРОИЗВОДСТВЕ……..……. 363
Шапкин М.П., Тагирова А.А., Габбасов Р.Р., Степухов Е.М., Галиева Э.В., Валитов В.А.
МИКРОСТРУКТУРА И МИКРОТВЕРДОСТЬ ТВЕРДОФАЗНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ИЗ РАЗНОИМЕННЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ ЭК61 И ЭП741НП……...……. 365
Шаркеев Ю.П., Ерошенко А.Ю., Легостаева Е.В., Лугинин Н.А.
УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОЕ СОСТОЯНИЕ И ДЕФОРМАЦИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ БИОИНЕРТНЫХ ТИТАНОВЫХ И РЕЗОРБИРУЕМЫХ МАГНИЕВЫХ СПЛАВОВ……..…..…….. 366
Шахов Р.В., Зайнуллин Р.И., Ганеев А.А., Мухтаров Ш.Х., Имаев В.М.
ПОСТРОЕНИЕ КАРТ ГОРЯЧЕЙ ОБРАБОТКИ ДЛЯ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО RE-СОДЕРЖАЩЕГО НИКЕЛЕВОГО СПЛАВА…….…….. 368
Шаяхметова Э.Р., Мурзинова М.А., Назаров А.А.
ВЛИЯНИЕ ИСХОДНОЙ СТРУКТУРЫ ПЛАСТИН МЕДИ НА КАЧЕСТВО ТОЧЕЧНЫХ СОЕДИНЕНИЙ, ПОЛУЧЕННЫХ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ СВАРКОЙ…….…… 369
Швейкин А.И., Шарифуллина Э.Р., Вшивкова А.А., Вильдеман В.Э., Оглезнева С.А.
МНОГОУРОВНЕВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГОРЯЧЕЙ И СВЕРХПЛАСТИЧЕСКОЙ ФОРМОВКИ ИЗДЕЛИЙ ИЗ АЛЮМИНИЕВЫХ СПЛАВОВ…….. 370

Шугаев О.В., Романов Д.А., Громов В.Е., Денисенко Е.С.
ВЫЯВЛЕНИЕ МОРФОЛОГИИ ПЕРЛИТА, ФОРМИРУЮЩЕГОСЯ В ПРОЦЕССЕ ИЗГОТОВЛЕНИЯ РЕЛЬСОВ ИЗ СТАЛИ ЗАЭВТЕКТОИДНОГО СОСТАВА……..…… 372
Шунаев В.В., Петрунин А.А., Глухова О.Е.
КВАНТОВАЯ ЁМКОСТЬ КОМПОЗИТА ГРАФЕН/LCO В ПРОЦЕССЕ ЛИТИРОВАНИЯ……..…… 373
Щербакова О.О., Буковский П.О., Муравьева Т.И.
ИЗМЕНЕНИЕ ТРИБОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК И ТОПОГРАФИИ ПОВЕРХНОСТИ ЭПИХЛОРГИДРИНОВЫХ КАУЧУКОВ ПРИ ДОБАВЛЕНИИ В ИХ СОСТАВ НАНОАЛМАЗОВ ……..……..… 375
Юсупова Н.Р., Ганеев А.А., Имаев В.М., Имаев Р.М.
РАЗРАБОТКА И ИССЛЕДОВАНИЕ НОВЫХ ЦИРКОНИЕВЫХ СПЛАВОВ ДЛЯ ЯДЕРНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ……... 378

При подготовке электронного издания использовались следующие программные средства:

- Adobe Acrobat − текстовый редактор;
- Microsoft Word – текстовый редактор.

Все права защищены. Книга или любая ее часть не может быть скопирована, воспроизведена в электронной или механической форме, в виде фотокопии, записи в память ЭВМ, репродукции или каким-либо иным способом, а также использована в любой информационной системе без получения разрешения от издателя. Копирование, воспроизведение и иное использование книги или ее части без согласия издателя является незаконным и влечет уголовную, административную и гражданскую ответственность.

Научное издание

ФИЗИКА И ТЕХНОЛОГИЯ ПЕРСПЕКТИВНЫХ МАТЕРИАЛОВ – 2026
(PHYSICS AND TECHNOLOGY OF ADVANCED MATERIALS – 2026)

Сборник трудов
Международной конференции
(г. Уфа, 4–9 октября 2026 г.)

Научное электронное издание сетевого доступа

За достоверность информации, изложенной в статьях,
ответственность несут авторы.
Статьи публикуются в авторской редакции

Подписано к использованию 14.10.2026 г.
Гарнитура «Times New Roman». Объем 35,5 Мб.
Заказ 282.

ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий»
450008, Башкортостан, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12.

Тел.: +7-908-35-05-007
e-mail: red@uust.ru