Проект FWRW-2021-0002

ИФПМ СО РАН

ЕДИНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОРИСТЫХ КЕРАМИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ ОТ СТАТИСТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ПОР

Е.В. Шилько[1] (+73822286971, shilko@ispms.ru), **А.С. Григорьев**[1] (+73822286974, grigoriev@ispms.ru)**, К. Андреев**[2] (kpandreev@gmail.com)

Публикация: Shilko E.V., Grigoriev A.S., Korostelev S.Yu., Volobuev A.S., Andreev K. Effect of geometrical features of pores on the mechanical properties and fracture of ceramic materials // Engineering Fracture Mechanics. – 2026. – Vol. 331. – Article 111732. DOI: 10.1016/j.engfracmech.2025.111732

Механические свойства конструкционных и функциональных керамических материалов контролируются пористостью и геометрическими характеристиками пор. Вследствие широкого разнообразия особенностей морфологии порового пространства до сих пор не установлены общие для различных керамик зависимости макроскопических свойств от геометрических параметров пор. Решение этой фундаментальной проблемы предложено научным коллективом ИФПМ СО РАН. С использованием компьютерного моделирования впервые определены три типа геометрических параметров пор, которые определяют эффективные модули упругости, прочность и хрупкость разрушения керамик. Впервые построены единые зависимости (master curves) эффективных механических характеристик керамических материалов от безразмерных комбинаций трёх выявленных категорий параметров пор. Единые кривые являются логистическими функциями и применимы к керамикам различного химического состава с поровой структурой различной морфологии. Полученные аналитические зависимости актуальны для решения задач структурного дизайна перспективных керамических материалов, прогнозирования комплекса их механических свойств и разработки цифровых двойников.

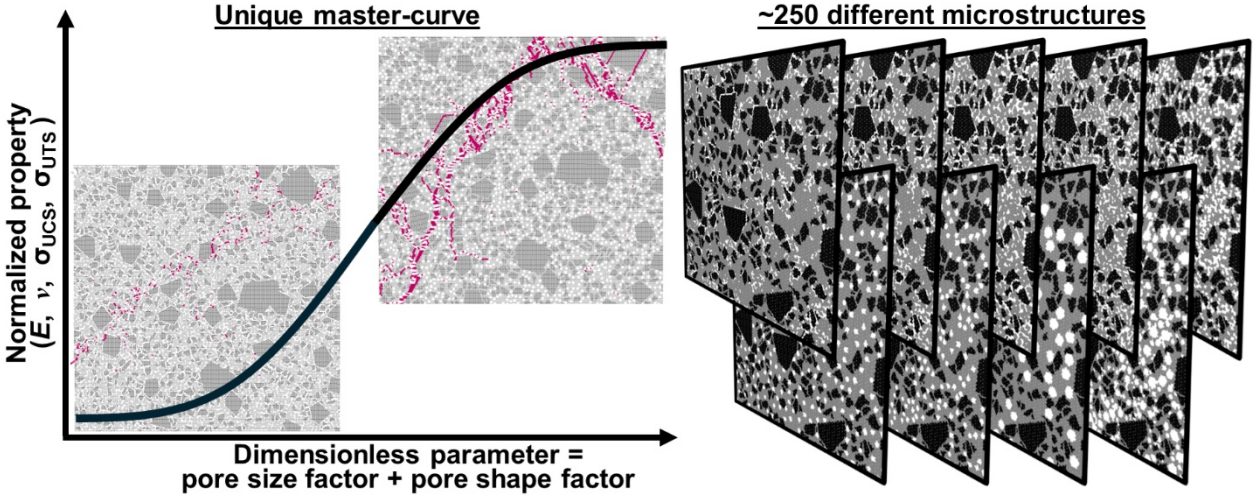


Рисунок – Логистический вид зависимости нормированных значений макроскопических механических характеристик пористых керамик от комбинации геометрических параметров пор и примеры представительных объемов пористых керамических материалов.

Проект FWRW-2021-0003

ИФПМ СО РАН

МЕХАНИЗМЫ КРАТНОГО ПОВЫШЕНИЯ УСТАЛОСТНОЙ ДОЛГОВЕЧНОСТИ НИКЕЛИДА ТИТАНА, ОБУСЛОВЛЕННЫЕ ИОННО-ПУЧКОВОЙ МОДИФИКАЦИЕЙ ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ

Л.Л. Мейснер(llm@ispms.ru), **С.В. Панин**(svp@ispms.ru), **С.Н. Мейснер**(msn@ispms.ru), **А.А. Богданов**(bogdanov@ispms.ru), **Ф.А. Дьяченко**(dfa@ispms.ru), **М.Г. Остапенко**(artifakt@ispms.ru),

Публикации: [1] Meisner, L.L., Meisner, S.N., Panin, S.V., Bogdanov A.A. Low-cycle fatigue life and fracture of superelastic NiTi with surface layers modified by tantalum ions. *Journal of Materials Science*, 2025, https://doi.org/10.1007/s10853-025-10761-5, Q1, импакт-фактор журнала 4.
[2] Ostapenko M.G., Semin V.O., D'yachenko F.A., Yuzhakova S.I. Structure of the Ion-Beam Treated Ti – Ni and Ti – Ni – Cu – Zr SMA // Proceedings of the XVII International Russian-Chinese Symposium "Advanced Materials and Processes". 2025, 1:192–195.

Изучено влияние поверхностной обработки в режиме высокодозовой имплантации ионов тантала на закономерности и механизмы деформации и разрушения при циклическом нагружении образцов сверхэластичного сплава NiTi. Показано, что в условиях нагружения, типичных для медицинских имплантатов, ионно-пучковая обработка приводит к повышению усталостной долговечности образцов NiTi в 2.5-3 раза (рис. 1), обусловленному изменением структуры поверхностного слоя (рис.2, 3). Выполнен анализ эволюции полей компонент деформации в зависимости от времени/числа циклов в необлученных и облученных образцах (рис. 4). Точки перегиба на зависимостях от числа циклов средних и локальных условных коэффициентов Пуассона $\nu^*_{ave} = -\frac{\varepsilon_{xx\,ave}}{\varepsilon_{yy\,ave}}$ и $\nu^*_{local} = -\frac{\varepsilon_{xx\,min}}{\varepsilon_{yy\,max}}$ (рис. 5, 6) являются точками перехода от стадии относительной стабильности проявления функциональных свойств NiTi к стадии ускоренной деградации этих свойств. Наиболее ярко эти эффекты проявляются на зависимостях $\nu^*_{local}(N)$, являясь предвестниками начала процесса усталостной деградации данных сплавов.

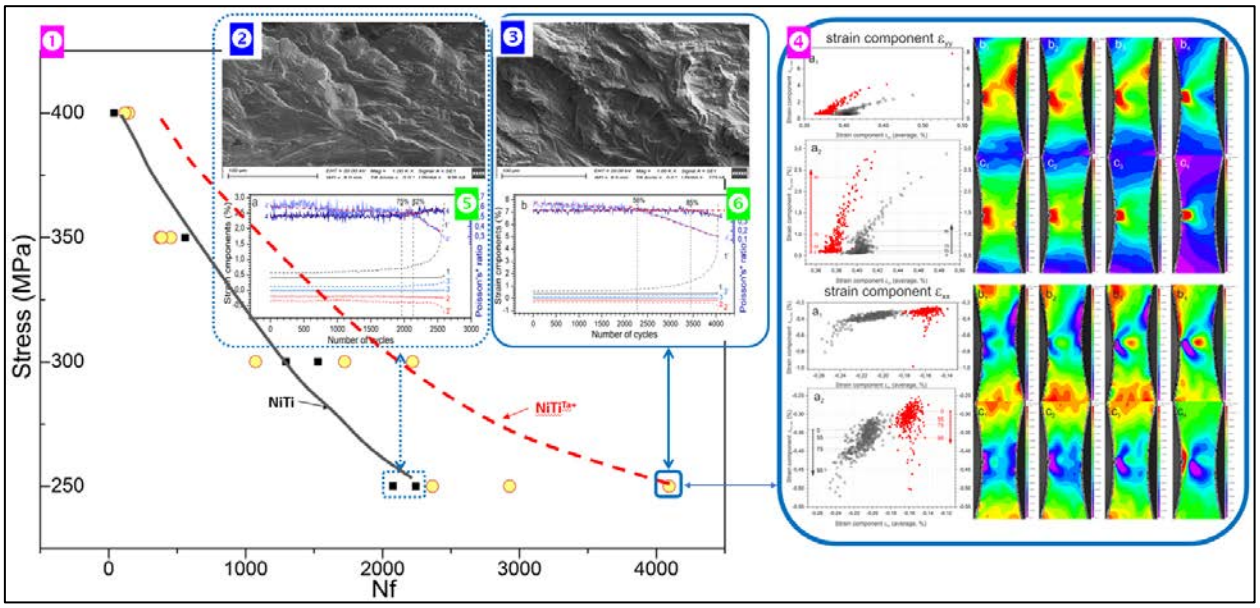


Рисунок. Диаграммы Веллера (1), усталостные изломы под необлученной (2) и облученной (3) поверхностями образца, эволюция компонент деформации и полей их распределения после достижения 25, 50, 75 и 90% усталостного ресурса, зависимости условных коэффициентов Пуассона от числа циклов в необлученных (5) и облученных (6) образцах

Проект FWRW-2021-0003

ИФПМ СО РАН

УСЛОВИЯ ПОВЫШЕНИЯ СОПРОТИВЛЕНИЯ ИЗНОСУ КОМПОЗИТА Ni_3Al-TiC ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИМ СИЛЬНОТОЧНЫМ ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ

К.О. Акимов (+7 3822 286 962, akimov_ko@ispms.ru), **К.В. Иванов** (+7 3822 286 858, ikv@ispms.ru)

Публикации: [1] Ivanov K.V., Akimov K.O. Low-energy high-current pulsed electron beam processing of Ni_3Al intermetallic compound at elevated temperature: the effect on microstructure and microhardness // Vacuum. – 2025. – Vol. 244 (A). – article number 114890, https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2025.114890.
[2] Ivanov K.V., Akimov K.O. Effect of low-energy high-current electron beam processing on friction and wear of Ni_3Al-TiC composite at elevated temperatures // Intermetallics (in press)

Установлено, что основными факторами, определяющими положительный либо отрицательный эффект от воздействия низкоэнергетическим сильноточным электронным пучком на сопротивление износу композиционного материала Ni_3Al-TiC, являются формирование рельефа, снижающего сопротивление износу, и упрочнение приповерхностного слоя, увеличивающее сопротивление. Соотношение указанных эффектов определяет итоговый результат влияния воздействия импульсным электронным пучком на сопротивление износу. Полученный результат позволит целенаправленно формировать микроструктуру с заданными характеристиками для достижения желаемых свойств.

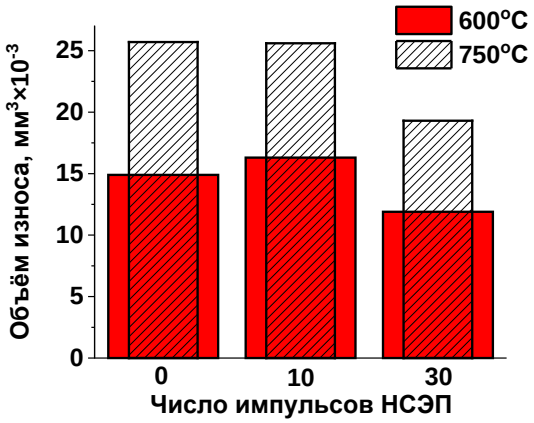


Рисунок – Зависимость объёма износа от числа импульсов НСЭП

Проект FWRW-2021-0004

ИФПМ СО РАН[1], ООО «Ультразвуковое оборудование и технологии» (г. Санкт-Петербург)[2]

ВЛИЯНИЕ УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОЙ СТРУКТУРЫ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ И АКУСТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТИТАНОВОГО СПЛАВА TI-4AL-2V

Е.В. Найденкин[1] (83822491245, nev@ispms.ru), Н.П. Коломеец[2] (79215924460, nikolom@mail.ru), И.П. Мишин[1] (, 83822286961, mishinv1@yandex.ru), И.В. Раточка[1](ivr@ispms.ru), О.Н. Лыкова (lon8@yandex.ru)

Naydenkin, E.V., Kolomeets, N.P., Ratochka, I.V., Lykova O. N., Mishin I. P. The effect of ultrafine-grained structure on mechanical and acoustic properties of Ti-4Al-2V alloy // Journal of Materials Science. – 2025. – Vol. 60. - P. 20617-20629. DOI: 10.1007/s10853-025-10836-3

Интенсивная пластическая деформация (ИПД) методом всестороннего прессования приводит к формированию в сплаве Ti-4Al-2V однородной глобулярной ультрамелкозернистой структуры со средним размером структурных элементов ~0,4 мкм. В результате этого наблюдается существенное повышение механических и акустических свойств указанного сплава. Так, значения пределов текучести и прочности сплава при комнатной температуре увеличиваются примерно на 70% по сравнению с крупнозернистым состоянием. На ступенчатых концентраторах волноводов из УМЗ сплава наблюдается уменьшение резонансной частоты по сравнению с крупнозернистым. Показано, что это связано с соответствующим изменением модуля Юнга сплава после ИПД обработки. Разрушение концентраторов волноводов из сплава с УМЗ структурой происходит при подводимой мощности ультразвука в 1,5-2 раза выше, чем в случае крупнозернистого аналога. Кроме того, в условиях циклической нагрузки значительно (на несколько порядков) увеличивается ресурс работы таких волноводов из УМЗ сплава при повышенной плотности мощности ультразвуковой акустической системы.

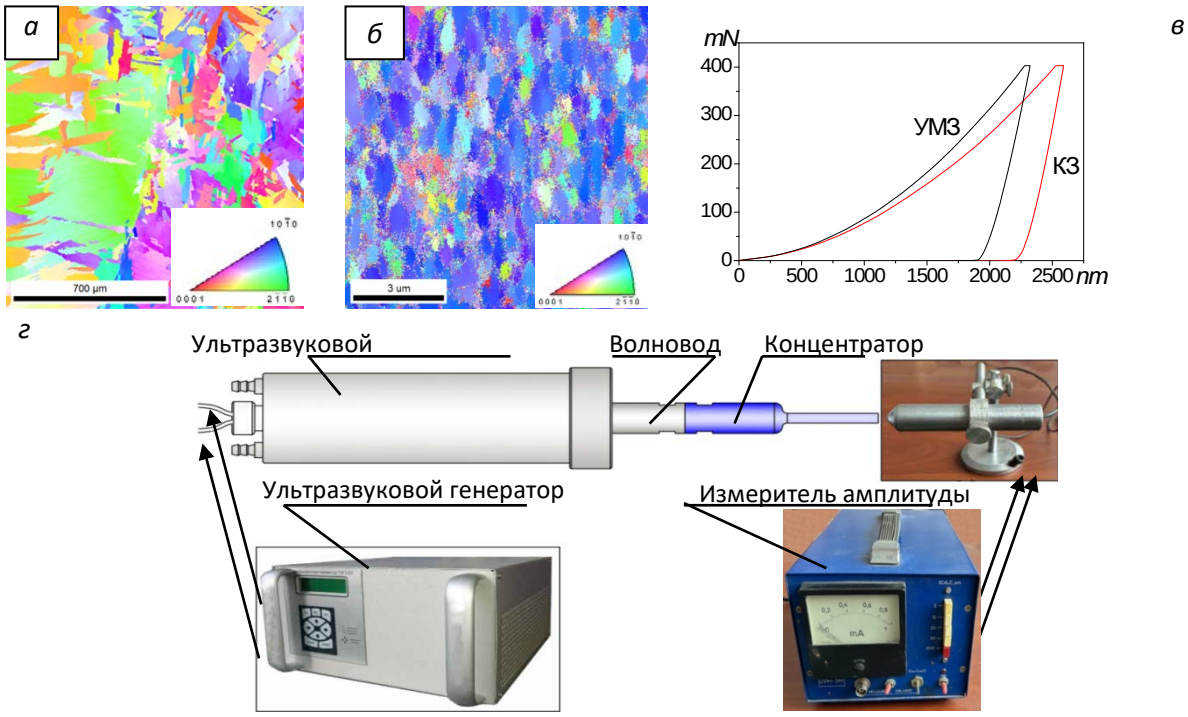


Рисунок – Микроструктура сплава Ti-4Al-2V в крупнозернистом (*а*) и УМЗ (*б*) состоянии, кривые нагружения при наноиндентировании (*в*) и схема акустических испытаний концентраторов волноводов (*г*)

Проект FWRW-2021-0004

ИФПМ СО РАН, НИУ ТПУ[2], НИУ ТГУ[3], УрФУ[4]

МИКРОСТУКТУРА И ДЕФОРМАЦИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ СПЛАВА TI-39,5NB-5ZR В КРУПНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ И УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОМ СОСТОЯНИЯХ ПРИ РАСТЯЖЕНИИ

Легостаева Е.В.[1] (83822286935, lego@ispms.ru), Ерошенко А.Ю[1]. (83822286911, eroshenko@ispms.ru), Шаркеев Ю.П[1]. (83822492850, sharkev@ispms.ru), Вавилов В.П.[2] (83822701777, vavilov@tpu.ru), Скрипняк В.А.[3] (382278669, skrp2006@yandex.ru), и др.

Eroshenko A.Yu., Legostaeva E.V., Uvarkin P.V., Tolmachev A.I., Khimich M.A., Kuznetsov V.P., Stepanov S.I., Vorontsov I.A., Mukanov G.Zh., Sharkeev Yu.P. Evolution of microstructure and mechanical properties of Ti-Nb-Zr and Ti-Nb-Zr-Ta-Sn alloys in severe plastic deformation // Materials Letters. – 2025. – Vol. 382. – P. 137805. DOI: 10.1016/j.matlet.2024.137805.

Формирование объёмной ультрамелкозернистой (УМЗ) многофазной (β+α+ω)-структуры в сплаве Ti-39,5Nb-5Zr комбинированным методом *abc*-прессования с многоходовой прокаткой приводит к повышению механических характеристик сплава ($\sigma_в$=1,1 ГПа, $H_μ$=2,7 ГПа) и оказывает значительное влияние на деформационное поведение при растяжении. Показано, что начальная стадия деформации с постоянной температурой, где практически вся энергия пластической деформации поглощается материалом, в 1,5 раза больше для сплава в УМЗ состоянии по сравнению с крупнокристаллическим (КК) состоянием, что в большей степени определяется субструктурным упрочнением и дисперсионным упрочнением наночастицами ω- и α-фаз. Перед разрушением УМЗ сплава имеет место резкое повышение температуры и снижение коэффициента деформационного упрочнения. Это сопровождается локальным разупрочнением УМЗ сплава и формированием областей с разориентированной ячеисто-сетчатой дислокационной субструктурой и крупных фрагментов с (β+α+ω)-структурой в отличии от КК сплава, где преимущественно наблюдаются полосы деформации с ячеисто-сетчатой дислокационной субструктурой.

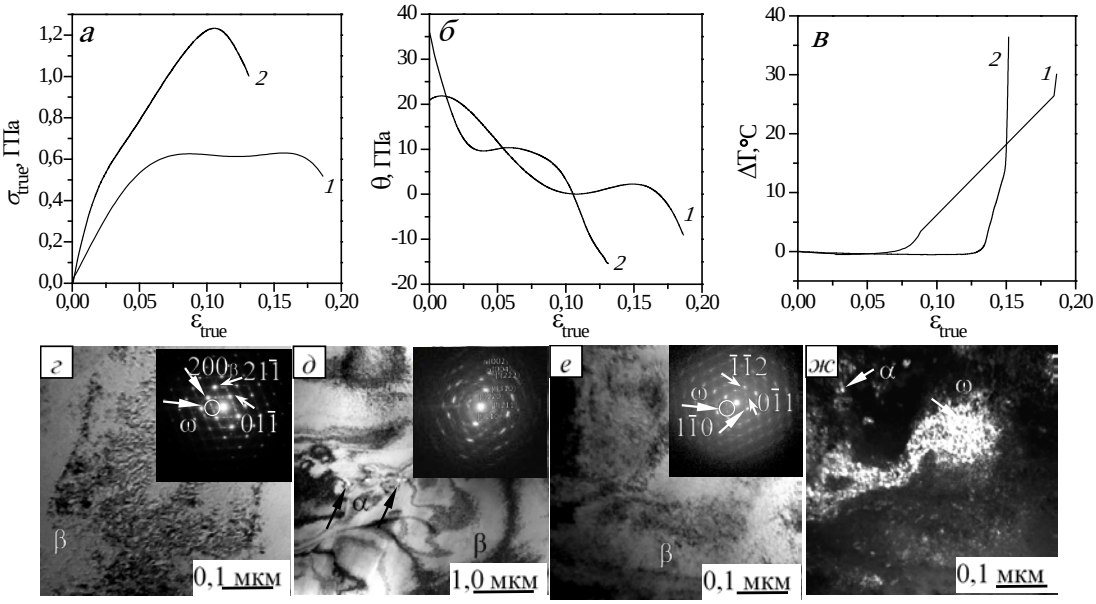


Рисунок – Зависимости истинной деформации (*а*), коэффициента деформационного упрочнения (*б*) и температуры (*в*) образца от истинной деформации и микроструктура сплава Ti-39,5Nb-5Zr на стадии предразрушения в КК (*г, д*) и УМЗ состояниях (*ж, з*): 1 – КК состояние; 2 – УМЗ состояние

Проект FWRW-2021-0004

ИФПМ СО РАН

ФОРМИРОВАНИЕ МЕЗОПОЛОС ДЕФОРМАЦИИ В НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ СВЕРХЭЛАСТИЧНОМ СПЛАВЕ НА ОСНОВЕ TiNi В ПРОЦЕССЕ МЕХАНИЧЕСКОГО ЦИКЛИРОВАНИЯ

С.Л. Гирсова С.Л. (286-820, girs@ispms.ru), Т.М. Полетика (286-820, poletm@ispms.ru)

Girsova S. L., Poletika T. M., Bitter S. M, and Mironov Yu. P. Deformation Structure Evolution during Mechanical Cycling of Nanocristalline TiNi alloy. Inorganic Materials: Applied Research, 2025, Vol. 16, No. 6, pp. 1737–1742. DOI: 10.1134/S2075113325701953

Исследована эволюция дефектной структуры нанокристаллического состаренного сверхэластичного сплава Ti-50,9 ат.% Ni в процессе механического циклирования в режиме нагружение-разгрузка. Установлено, что в процессе первых 10 циклов наблюдается накопление дислокаций с образованием сетчатой структуры с узлами, закрепленными частицами Ti_3Ni_4, что подавляет дислокационную активность. Формирование высокого уровня внутренних напряжений в образцах с ростом количества циклов способствует снижению сдвиговой устойчивости аустенитной B2 структуры и возникновению новых аккомодационных механизмов деформации. Впервые обнаружено, что результатом релаксации упругих напряжений в образцах нанокристаллического сверхэластичного сплава Ti-50,9 ат.% Ni является образование мезополос деформации, обеспечивающих коллективный характер переориентации кристаллической решетки, что способствует росту циклической стабильности проявления эффекта сверхэластичности. Формирование мезополос деформации рассматривается как следствие прямого плюс обратного мартенситного превращения по альтернативной системе, что обеспечивает локальную переориентацию решетки в результате мартенситного превращении и не сопровождается реальным поворотом материала в зоне превращения.

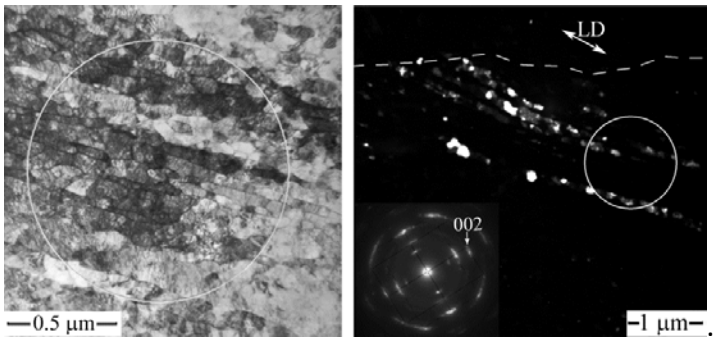


Рисунок – Светлополное и темнопольное изображения мезополосы переориентации в сплаве Ti–50,9 ат.% Ni после 20 циклов нагружение-разгрузка и микродифракция из выделенной области

Проект FWRW-2021-0005

ИФПМ СО РАН

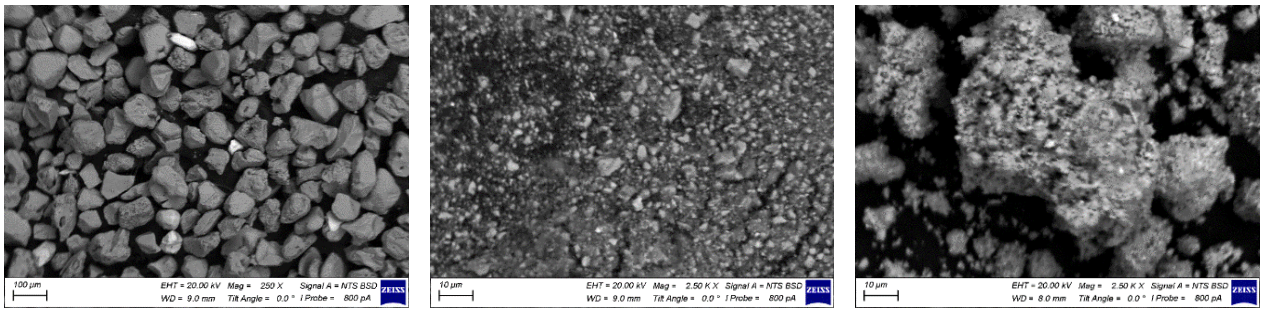
ЭКОНОМИЧНЫЙ СПОСОБ ПОЛУЧЕНИЯ КОМПОЗИЦИОННЫХ ПОРОШКОВ «КАРБИД ТИТАНА – ЖЕЛЕЗНАЯ СВЯЗКА» ДЛЯ НАПЫЛЕНИЯ И НАПЛАВКИ ИЗНОСОСТОЙКИХ ПОКРЫТИЙ

Г.А. Прибытков (тел. 286-967, E-male: gapribyt@mail.ru)**, И.А. Фирсина,** (тел. 8 (962) 787-35-26, E-male: iris1983@yandex.ru), **А.В. Барановский** (тел. 8 (999) 178-27-42, E-male: avb47@tpu.ru)

Публикация: Полученные результаты исследований готовятся к публикации в журнале “Metal Working and Material Science”

Железоматричные композиционные порошки, содержащие карбид титана в качестве упрочняющей фазы, широко применяются для напыления и наплавки износостойких покрытий. В качестве сырья для получения таких порошков служат порошковый титан или карбид титана, дороговизна которых тормозит широкое применение композиционных порошков в промышленность. Мы провели исследования, на основе результатов которых возможно кратно удешевить производство железоматричных композиционных порошков с карбидным упрочнением. Предлагаемый двухстадийный способ получения порошков включает обработку смеси порошков ильменитового концентрата, производимого предприятием «Ильменит» (Томская область), с техническим углеродом (сажей) в планетарной мельнице. В процессе обработки происходит измельчение порошка ильменита (рисунок а, б) и механоактивация смеси. Вторая стадия технологического процесса – высокотемпературный отжиг механоактивированной смеси. При отжиге в результате химической реакции ильменита с углеродом происходит восстановление железа и синтез карбида титана по реакции: $TiFeO_3$ +C → TiC+ Fe +O↑.

Согласно результатам рентгеноструктурного анализа продукты отжига содержат 87 об % карбида титана и 13 об % железа. Железо присутствует в структуре композита в виде светлых прослоек в карбидной матрице. Светлые частицы железа можно видеть также на поверхности гранул композиционного порошка (рисунок в).



а) б) в)

а) исходного концентрата ильменита;
б) механоактивированной смеси ильменит+сажа; в) продуктов отжига механоактивированной порошковой смеси ильменита и сажи (режим BSE).

Рисунок – Морфология порошков.

Проект FWRW-2021-0005

ИФПМ СО РАН

ВЗАИМОСВЯЗЬ ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МЕТАЛЛО-МАТРИЧНЫХ КОМПОЗИТОВ, УПРОЧНЕННЫХ КЕРАМИЧЕСКОЙ ФАЗОЙ, С РЕЖИМАМИ ИХ СИНТЕЗА ИЗ РЕАКЦИОННЫХ ПОРОШКОВЫХ СМЕСЕЙ

Е.Н. Коростелева (+709039138002, e-mail: elenak@ispms.ru), **В.В. Коржова** (телефон, e-mail: vicvic5@mail.ru)

Публикации:

1) Anisimova M.A., Knyazeva A.G., Korosteleva E.N., Nikolaev I.O. Chemical stresses at composite synthesis from Ti–Al–Fe–Fe_2O_3 powder mixture. *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics,* **2025**, 89(10): 2017–2024. DOI: 10.1134/S1062873825712887;

2) Князева А.Г., Коростелева Е.Н., Сафронова В.С. Спекание и термокинетическое моделирование эволюции состава термитных смесей в условиях регулируемого нагрева. *Известия вузов. Порошковая металлургия и функциональные покрытия*. **2025**, 19(5): 5–16. DOI:10.17073/1997-308X-2025-5-5-16;

3) Князева А. Г., Коростелева Е. Н., Коржова В. В. Фазообразование в порошковых материалах на основе Ti-Al-Fe-O с учетом диффузионно-кинетических явлений. *Химическая физика и мезоскопия*. **2025,** 27(3): 338-354. DOI: 10.62669/17270227.2025.3.32. (белый список, РИНЦ)

4) РИД: положительное решение о выдаче патента РФ по заявке № 2025112859/05 «Способ получения порошка из углеродистой стальной стружки, содержащего оксиды железа», авторы: Е.Н. Коростелева, В.В. Коржова. Приоритет от 16.05.2025г.

Выявлены закономерности механического и деформационного поведения пористых иерархически организованных металлокерамических материалов на основе титана с синтезированными *in-situ* керамическими и интерметаллидными включениями в зависимости от процедуры смешивания, вида порошкового компонента, его морфологии, состава и режимов синтеза металломатричного композита. Обнаружено, что при одном и том же элементном наборе порошковой композиции (Ti, Al, Fe, O, C), но с разной процедурой подготовки смеси, можно управлять структурообразованием, обеспечивая таким образом более высокие механические свойства спеченного порошкового материала.

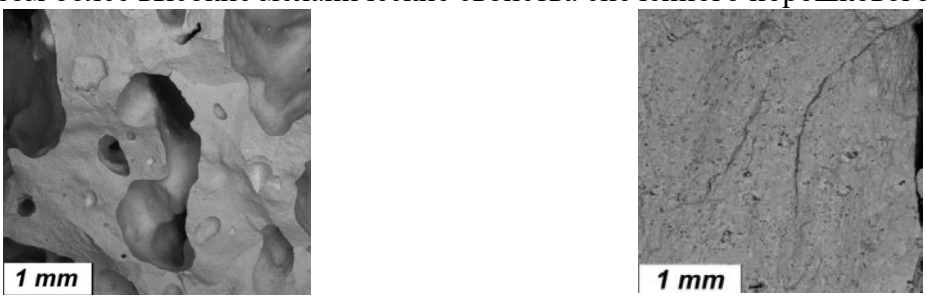
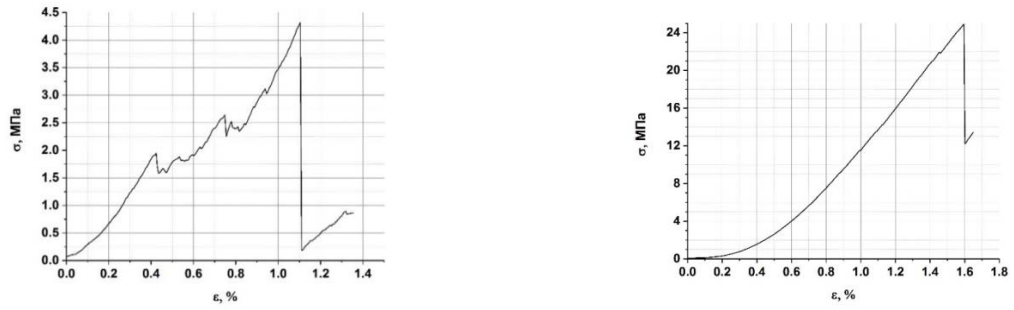


Рисунок – РЭМ-изображение излома после сжатия спеченных образцов Ti+Al+Fe_2O_3+C, приготовленных по разному режиму смешивания: (а) – простое смешивание порошковых компонентов (Ti, Al, Fe_2O_3 и C); (б) – двухэтапное смешивание Ti и C с продуктами механоактивации смеси (Al+Fe_2O_3)



а б

Рисунок – Диаграммы сжатия спеченных прессовок из порошковых смесей Ti+Al+Fe_2O_3+C, приготовленных по разному режиму смешивания: (а) – простое смешивание порошковых компонентов (Ti, Al, Fe_2O_3 и C); (б) – двухэтапное смешивание Ti и C с продуктами механоактивации смеси (Al+Fe_2O_3)

Проект FWRW-2021-0006

ИФПМ СО РАН

СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ИОННО-ПЛАЗМЕННЫХ ПОКРЫТИЙ НА ОСНОВЕ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ И ИХ НИТРИДОВ, НАНЕСЕННЫХ НА ПОВЕРХНОСТЬ БЕРИЛЛИЕВОЙ БРОНЗЫ

Н.В. Семенчук (+7(953)910-68-75, e-mail: natali.t.v@ispms.ru), **О.С. Новицкая** (+7(952) 686-61-92, e-mail: nos@ispms.ru)

Н.В. Семенчук , О.С. Новицкая. Структура и свойства ионно-плазменных покрытий на основе переходных металлов и их нитридов, нанесенных на поверхность бериллиевой бронзы, Физическая мезомеханика (в печати, Том 28, № 6, 2025г), IF 1,720.

Исследована микроструктура и износостойкость различных покрытий на основе переходных металлов и их нитридов, нанесенных на бериллиевую бронзу. Установлено, что многослойные покрытия CrN/TiN и покрытия с переходным подслоем Cu-Ti демонстрируют наилучшую адгезию, выдерживая нагрузки до 30 Н, и наибольшую устойчивость к износу за счет механизма микроабразивного трения без катастрофического разрушения. Использование переходного слоя Cu-Ti значительно повышает прочность сцепления покрытий с подложкой, снижая напряжения на границе раздела. Показано, что именно эти типы покрытий являются наиболее перспективными для повышения износостойкости бериллиевой бронзы в условиях высоких нагрузок.

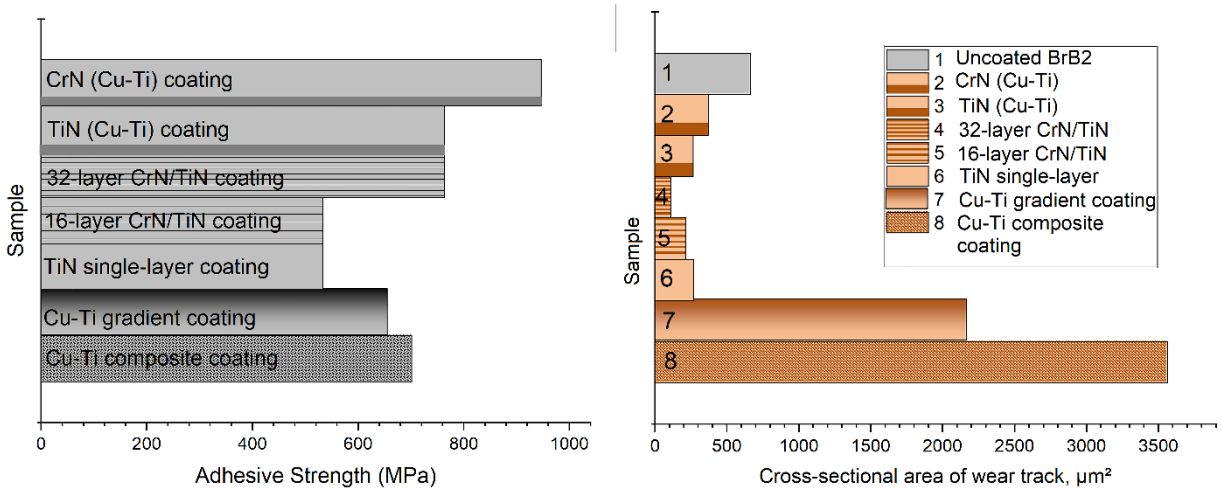


Рисунок – Адгезионная прочность (a) и площадь поперечного сечения дорожек износа покрытий (b), нанесенных на поверхность бериллиевой бронзы

Проект FWRW-2021-0006

ИФПМ СО РАН

ВЛИЯНИЕ СОДЕРЖАНИЯ АЛЮМИНИДОВ ЖЕЛЕЗА НА СТРУКТУРУ И ТРИБОМЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СПЕЧЕННЫХ КОМПОЗИТОВ С МАТРИЦЕЙ СОСТАВА Al-20Sn (% ОБ.)

Н.М. Русин[1] (р.т. (3822) 286844; rusinnm@mail.ru), **А.Л. Скоренцев**[2] (р.т. (3822) 286862; skoralexan@mail.ru)

Русин Н.М., Скоренцев А.Л. Износостойкий антифрикционный композиционный материал на основе алюминия и способ его получения. Патент RU № 2833648. – опубл. 28.01.2025.

Установлено, что при спекании смеси порошков Al, Sn и Al3Fe последние относительно равномерно располагаются вместе с оловом на границах зёрен матрицы композита (рис. 1а). Тогда как при спекании смеси (Э) из элементарных порошков Al, Sn и Fe на месте последних образуются агломераты из множества частиц алюминидов железа Al3Fe, сцементированных оловом. В свою очередь, установленный характер распределения тугоплавких частиц по объёму композита влияет на формирующуюся в процессе спекания зёренную структуру матрицы – в первом случае она мельче, чем во втором. При равных составах спеченные образцы с мелкозернистой матрицей демонстрируют лучшую пластичность и прочность при испытаниях на сжатие (рис. 1б), а также износостойкость при сухом трении по стали. Следовательно, упрочнение порошковых сплавов Al-Sn готовыми частицами Al3Fe более эффективно, чем упрочнение частицами, синтезированными «in situ» вследствие взаимодействия порошков чистого железа и алюминия в процессе спекания прессовок.

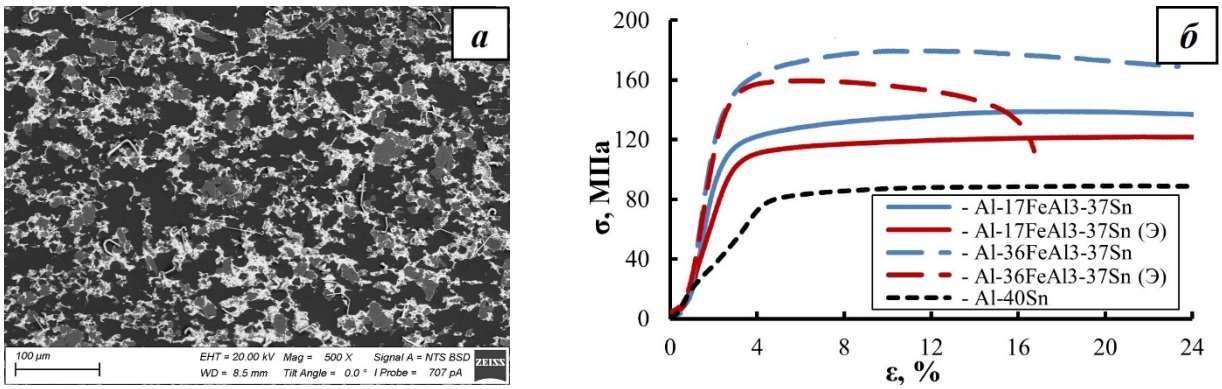


Рисунок – Структура спеченного композита Al-17Al3Fe-38Sn (масс. %), полученного с добавлением заранее синтезированного порошка Al3Fe (а); кривые сжатия алюмоматричных композитов (б)

Установлено, что основным механизмом изнашивания полученных композитов при сухом трении по стали является отслоение алюминиевых зерен по исчерпавшим ресурс пластичности оловянным прослойкам. Содержащиеся в композитах частицы Al3Fe сдерживают сближение и относительное смещение деформируемых зёрен и замедляют их отслоение. Оптимальное их содержание, обеспечивающее максимум износостойкости исследуемых композитов, составляет около 30 %. При дальнейшем увеличении концентрации твёрдых частиц число хрупких контактов между ними быстро возрастает, что приводит к охрупчиванию материала и его преждевременному разрушению под нагрузкой.

Проект FWRW-2021-0007

ИФПМ СО РАН

ВЛИЯНИЕ УЛЬТРАЗВУКОВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ ПРИ МИКРОДУГОВОМ ОКСИДИРОВАНИЯ НА СТРУКТУРУ, СОСТАВ И СВОЙСТВА КАЛЬЦИЙ-ФОСФАТНЫХ БИОПОКРЫТИЙ НА ТИТАНЕ

Е.Г. Комарова[1] (+73822286809, katerina@ispms.ru), Е.Б. Акимова[1] (+73822286809, akimovaeb@yandex.ru), Е.А. Казанцева[1] (+73822286809, kazantseva.ea@ispms.ru), А.Л. Жарин[2] (+375172939619, anatoly.zharin@gmail.com), Ю.П. Шаркеев[1] (+73822492850, sharkeev@ispms.ru)

Публикация: Komarova E.G., Akimova E.B., Kazantseva E.A., Zharin A.L., Sharkeev Yu.P. Effect of ultrasonic power applied to micro-arc oxidation on the morphology, chemistry, wettability and electrical properties of calcium phosphate coatings on titanium // Journal of Alloys and Compounds. – 2025. – V. 1039. – P. 183056. DOI: 10.1016/j.jallcom.2025.183056 (IF 6.3)

Установлено, что ультразвуковое (УЗ) воздействие различной мощности (50, 100, 200 Вт) при микродуговом оксидировании (МДО) приводит к структурно-фазовой трансформации в покрытиях из рентгеноаморфного состояния до аморфно-кристаллического состояния с формированием кальций-фосфатных (КФ) фаз CaHPO4 и β-Ca2P2O7, к увеличению количества кальция и фосфора, и улучшению гидрофильности покрытий. Повышение мощности УЗ до 100 Вт при МДО сопровождается увеличением толщины, внутренней пористости и объемной доли областей деструкции на поверхности покрытий, а также уменьшением поверхностной пористости. Дальнейшее увеличение мощности УЗ от 100 до 200 Вт не приводит к существенным изменениям в микроструктуре покрытий, по сравнению с покрытиями, сформированными без УЗ. Минимальная мощность УЗ 50 Вт обеспечивает формирование КФ покрытия с наиболее высоким отрицательным зарядом поверхности –146 мВ и свободной поверхностной энергией 74,6 МДж/м2, и наименьшими краевыми углами смачивания менее 17,1°. Разработанные электретные КФ биопокрытия на костных имплантатах с отрицательным поверхностным потенциалом –146 мВ, микрошероховатостью 3,5 мкм, высокой пористостью 15-30 % и высокой свободной поверхностной энергией 74,6 МДж/м2 потенциально могут ускорить сцепление поверхности имплантатов с окружающими тканями путем комбинированного химического, механического и биоэлектрического взаимодействия.

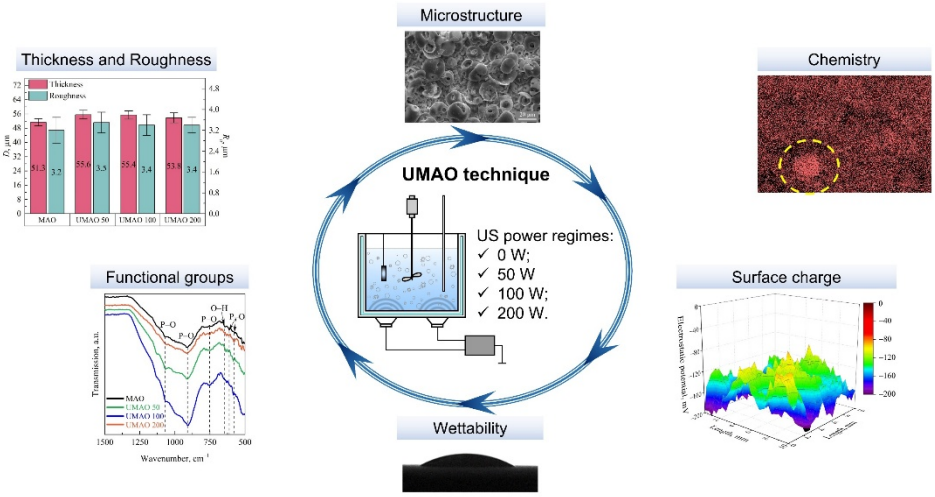


Рисунок – Схема получения кальций-фосфатных покрытий методом МДО с УЗ воздействием разной мощности и результаты исследования микроструктуры, химического состава, физических и электрических свойств покрытий

Проект FWRW-2021-0007

ИФПМ СО РАН

ВЛИЯНИЕ МИКРОЧАСТИЦ НА ФОРМИРОВАНИЕ, СТРУКУТРУ И СВОЙСТВА МИКРОДУГОВЫХ ПОКРЫТИЙ

М.Б. Седельникова[1] (8(3822)286-887, mariyased@ispms.ru), А.В. Угодчикова[2] (8(952)-916-7529, ugodch99@gmail.com), Т.В. Толкачева[1] (8(3822)286-887, tolkacheva@ispms.ru), П.В. Уваркин (8(3822)286-911, uvarkin@ispms.ru), М.А. Химич (8(3822)286-887, khimich@ispms.ru), Ю.П. Шаркеев (8(3822)490-850, sharkeev@ispms.ru), А.Д. Кашин, (8(3822)286-887, kash@ispms.ru), И.А. Глухов (8(3822)286-809, gia@ispms.ru).

Публикация: A.V. Ugodchikova, T.V. Tolkacheva, P.V. Uvarkin, M.A. Khimich, Y.P. Sharkeev, A.D. Kashin, I.A. Glukhov, M.B. Sedelnikova, Micro-arc coatings with different types of microparticles on titanium alloy: Formation, structure and properties // Crystals. – 2025. – Vol. 15. – P. 811, https://doi.org/10.3390/cryst15090811. IF=2.4

Выявлено влияние микрочастиц β- трикальцийфосфата (β-ТКФ) и волластонита на кинетику формирования и свойства микродуговых покрытий на титановом сплаве ВТ1-0. Показано, что введение частиц β-ТКФ с более отрицательным значением дзета-потенциала, равным –47, способствовало повышению удельной электропроводности электролита до 2,87 См/м и интенсивности протекания процесса микродугового оксидирования (МДО) в анодном потенциостатическом режиме. Комбинированные покрытия с частицами β-ТКФ и волластонита характеризовались более высокой скоростью роста (0,15 мкм/с) и адгезионной прочностью (критическая нагрузка Lc = 22 Н), что свидетельствует о перспективности их использования для медицинских имплантатов.

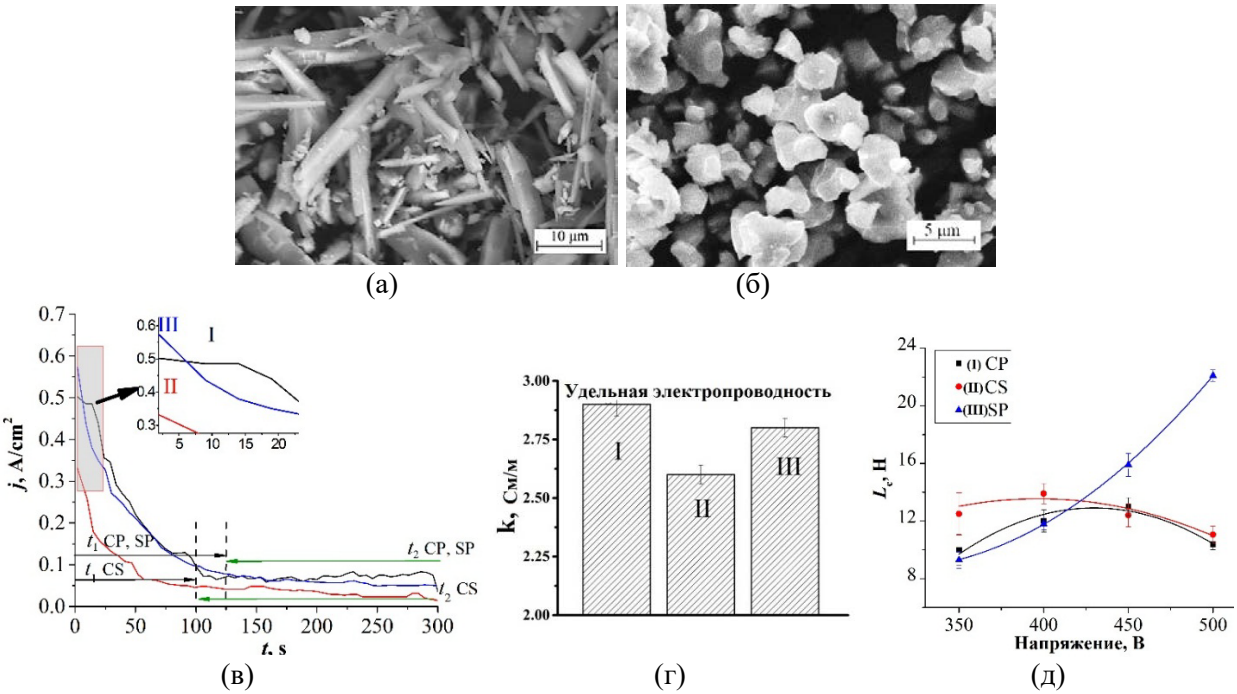


Рисунок – СЭМ-изображения (а) – частицы волластонита, (б) – частицы β-ТКФ, (в) – графики зависимости плотности тока от длительности процесса МДО в трех электролитах (I, II, III), (г) – диаграмма зависимости удельной электропроводности электролитов от содержания в них микрочастиц: (I) – β-ТКФ, (II) – волластонита, (III) – β-ТКФ и волластонита, (д) – графики зависимости критической нагрузки при скретч-тестировании от напряжения процесса МДО для покрытий, полученных в трех электролитах (I, II, III).

Проект FWRW-2021-0008

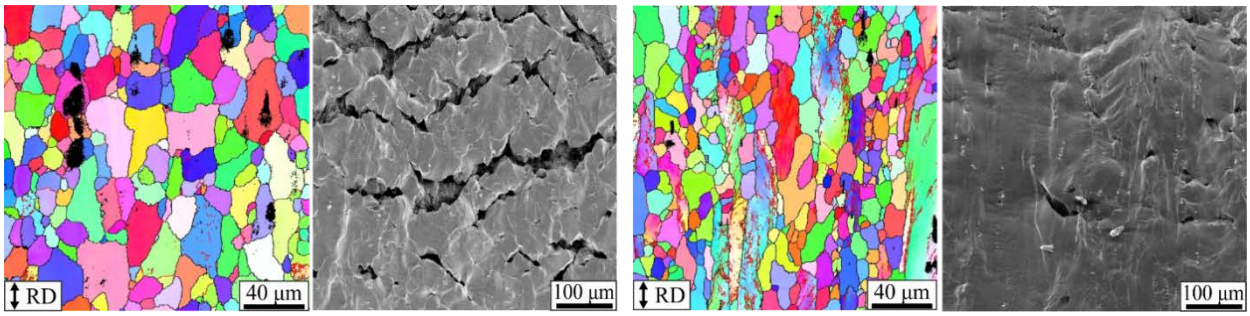
ИФПМ СО РАН

ПОВЫШЕНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ СТАБИЛЬНОСТИ И ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПРОЧНОСТИ СПЛАВОВ СИСТЕМЫ V-Ta-Cr-Zr ПУТЕМ ОПТИМИЗАЦИИ ЭЛЕМЕНТНОГО СОСТАВА

И.А. Дитенберг, И.В. Смирнов, К.В. Гриняев, Д.А. Осипов

Публикация: Influence of concentration composition on dispersion strengthening efficiency of V-Ta-Cr-Zr system alloys // Metallography, Microstructure, and Analysis. – 2025. – V.15., https://link.springer.com/article/10.1007/s13632-025-01278-z, импакт-фактор журнала 1.6.

Установлено, что в дисперсном упрочнении сплавов системы V-Ta-Cr-Zr и связанных с ним эффектами задействуется только часть второй фазы, представленной наиболее мелкими наноразмерными частицами. Трансформация структурно-фазового состояния в условиях реализации термомеханической обработки по режиму II обеспечивает высокую эффективность совместного дисперсного плюс субструктурного упрочнения, что, в свою очередь, способствует повышению прочности сплава при сохранении высокого уровня пластичности, как при комнатной, так и при повышенных температурах. Диспергирование и перераспределение по объему выделяемых в процессе термомеханической обработки стабильных частиц на основе ZrC обеспечивают повышение термической стабильности сплава за счет закрепления этими частицами элементов дефектной субструктуры, предотвращает раскрытие трещин вдоль границ зерен при растяжении. Увеличение объемной доли второй фазы (от 0.47 до 0.52 %) при модификации элементного состава, способствует увеличению значений кратковременной прочности при 800 °С от 185 до 212 МПа на фоне полуторакратного повышения пластичности. Более того, при повышении температуры испытаний до 900 °С уровень кратковременной прочности составил 201 МПа, что на 15 МПа выше по сравнению со значениями, полученными на сплаве с меньшей объемной долей второй фазы при 800 °С. Уровень пластичности при этом для обоих сплавов составляет около 20 %.



а, б, – ТМО - I; в, г – ТМО - II.

Рисунок – Карты ориентации зерен (а, в) и изображения боковых поверхностей образцов после растяжения при 800 °С (б, г). Стабилизацией при 1100 °С. Сканирующая электронная микроскопия

Проект FWRW-2021-0008

ИФПМ СО РАН

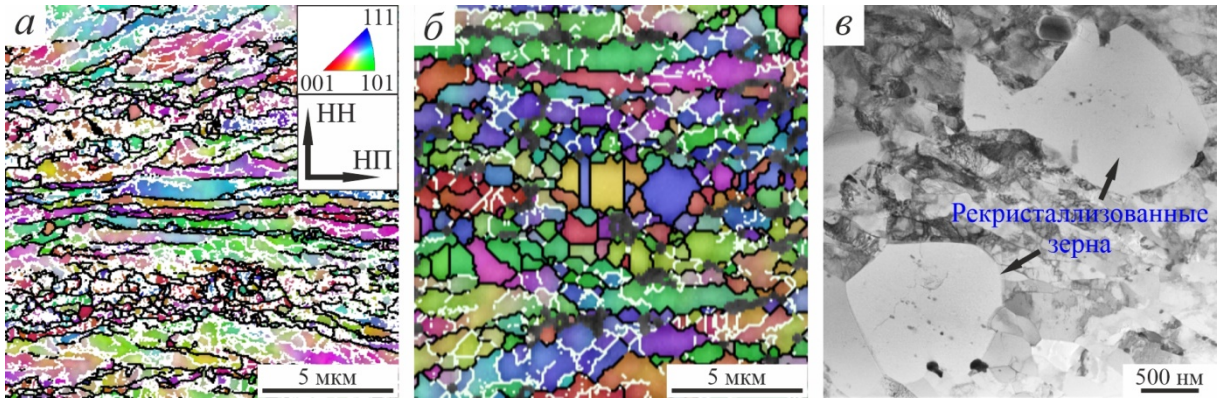
ВЛИЯНИЕ МНОГОПРОХОДНОЙ ТЕПЛОЙ ПРОКАТКИ И ОТЖИГА НА МИКРОСТРУКТУРУ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АУСТЕНИТНОЙ СТАЛИ ЭК-164

С.А. Аккузин (89521624143, s.akkuzin@ispms.ru), **И.Ю. Литовченко** (89138241694, litovchenko@ispms.ru), **Н.А. Полехина** (89234214737, nap@ispms.ru), **А.В. Ким** (89234170978, kim.a.v@ispms.ru) **К.В. Спиридонова** (89234065025, almaevakv@ispms.ru), **Е.Н. Москвичев** (89138095914, em_tsu@mail.ru)

Публикация: Akkuzin S., Litovchenko I., Polekhina N., Kim A., Spiridonova K., Moskvichev E. Effect of multi-pass warm rolling and annealing on microstructure and mechanical properties of an austenitic steel // Journal of Materials Engineering and Performance. – 2025. https://doi.org/10.1007/s11665-025-11472-3, IF 2.0

Исследована микроструктура и механические свойства аустенитной стали ЭК-164 после многопроходной теплой прокатки при 600 °С с общей степенью деформации $e = 2$ и последующим отжигом при 800 °С в течение 1 ч.

Теплая деформация приводит к уменьшению среднего размера зерна от 19,3 до 0,4 мкм и формированию двух типов зерен: вытянутых в направлении прокатки и сплющенных в плоскости прокатки зерен, а также равноосных зерен субмикрокристаллического масштаба. Показано, что формирование второго типа зерен связано с фрагментацией в процессе теплой деформации без участия динамической рекристаллизации. Последующий отжиг приводит к развитию процессов возврата, полигонизации и первичной рекристаллизации в отдельных областях деформированной структуры с увеличением среднего размера зерна от 0,4 до 1 мкм. Установлено, что выделение мелкодисперсных частиц типа МС способствуют закреплению дислокаций и границ зерен, что препятствует их активной миграции и росту рекристаллизованных зерен. Указанная микроструктура обеспечивает высокий уровень механических свойств стали: при Т = 20 °С предел текучести составляет 685 МПа, удлинение до разрушения – 17,5 %; при Т = 650 °С – 512 МПа и 10,9 %, соответственно.



а – ориентационная карта после многопроходной теплой прокатки;
б – ориентационная карта после многопроходной теплой прокатки и последующего отжига;
в – изображение фрагментированной структуры с двумя рекристаллизованными зернами, полученное с помощью сканирующей просвечивающей электронной микроскопии.

Рисунок – РЭМ ДОРЭ (а, б) и ПЭМ (в) изображения микроструктуры стали ЭК-164 в различных структурных состояниях

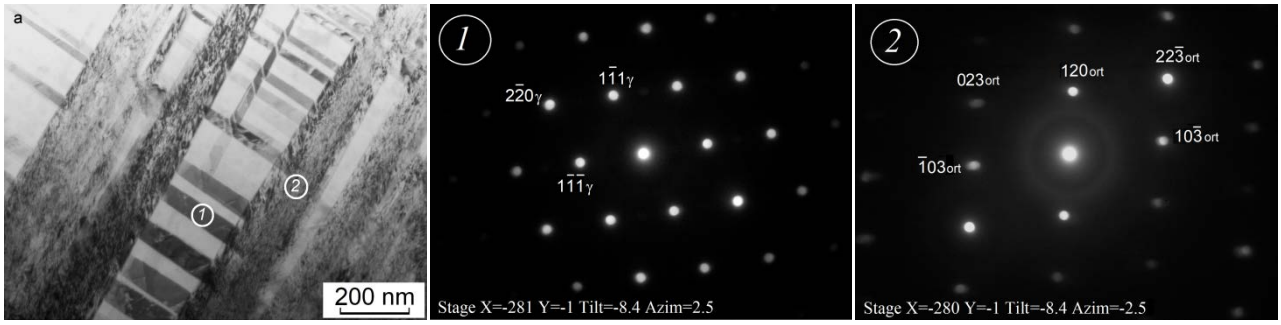
Проект FWRW-2021-0009

ИФПМ СО РАН

ОБНАРУЖЕНО В АУСТЕНИТНОЙ CRMNN СТАЛИ НЕ ОПИСАННОЕ РАНЕЕ МАРТЕНСИТНОЕ ПРЕВРАЩЕНИЕ ПРИ КРИОГЕННОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ ДЕФОРМИРОВАНИЯ С ТРАНСФОРМАЦИЕЙ ГЦК РЕШЕТКИ В ОРТОРОМБИЧЕСКУЮ

Н.А. Наркевич, О.Б. Перевалова

N.A. Narkevich, O.B. Perevalova, Local crystal lattice distortions and phase transformations in high-nitrogen CrMn austenitic steel during tensile tests at temperatures of 293–77 K // Materials Today Communications 2025, 113171. DOI: 10.1016/j.mtcomm.2025.113171



б в

Рисунок – ТЭМ исследование структуры CrMnN стали после испытаний на растяжение при -196°C: (а) светлопольное изображение; (б) нанодифракция от области *1;* (в) нанодифракция от области *2.*

Показано, что при низких климатических и криогенной температурах испытаний изменение упругих микроискажений кристаллической решетки описывается кривой с максимумом, соответствующим температуре 230 К. При более низких температурах локальные искажения ГЦК-решетки и концентрация деформационных дефектов упаковки уменьшались. На основании этих данных и электронно-микроскопических исследований, сделан вывод о том, что микроискажения по достижении максимальных значений являются триггером начала структурных перестроек, связанных с превращениями аустенита в мартенсит с ГПУ (ε) решеткой и мартенсит с орторомбической решеткой (ort). При этом фазовое превращение γ→ort предшествовало образованию ε-мартенсита. Полученный результат является базисом в понимании причин хрупкости высокоазотистых сталей при криогенной температуре и обоснованием надежности и экономической целесообразности их применения в условиях Арктики. Для преодоления хрупкости при криогенной температуре деформирования необходимо ограничивать величину эксплуатационных нагрузок, повысив, таким образом коэффициент запаса прочности и использовать мелкозернистые (1-2 мкм) высокоазотистые стали.

Проект FWRW-2021-0010

ИФПМ СО РАН

ПРИМЕНЕНИЕ ИСКУССТВЕННОГО НЕЙРОСЕТЕВОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ПРОЕКТИРОВАНИЯ АНТИФРИКЦИОННЫХ БИНАРНЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ПЭЭК

Д.Ю. Степанов, Д.Г. Буслович, С.В. Панин, А.В. Первиков

Changjun He, Dmitry Y. Stepanov, Dmitry G. Buslovich, Sergey V. Panin, Alexander V. Pervikov. Application of artificial neural network (ANN) modeling for design of antifriction binary PEEK-based nanocomposites Tribology International 214 (2026) 111373. https://doi.org/10.1016/j.triboint.2025.111373. IF=6.9 (JCR)

Проведено исследование взаимосвязи между структурными и механическими факторами, а также трибологическими характеристиками бинарных нанокомпозитов на основе ПЭЭК с целью проектирования антифрикционных материалов с использованием ограниченного числа экспериментальных результатов. Варьировали шесть факторов (входных параметров), включая объемную долю наполнителя, удельную площадь поверхности наночастиц, а также механические свойства композитов. Учитывая сложные взаимосвязи между этими факторами, был использован набор методов, включая корреляционный и регрессионный анализ, а также моделирование с использованием искусственных нейронных сетей, что позволило более точно определить их влияние на трибологические характеристики нанокомпозитов. В соответствии с проведенным Шеп-анализом значимости рассмотренных факторов было установлено, что ключевыми из них были модули упругости и предельные значения прочности при растяжении, а также объемные доли наполнителя и удельные площади поверхности наночастиц. Разработанный подход позволяет минимизировать массивы необходимых экспериментальных данных при разработке нанокомпозитов на основе ПЭЭК с повышенными эксплуатационными свойствами для передовых отраслей промышленности.

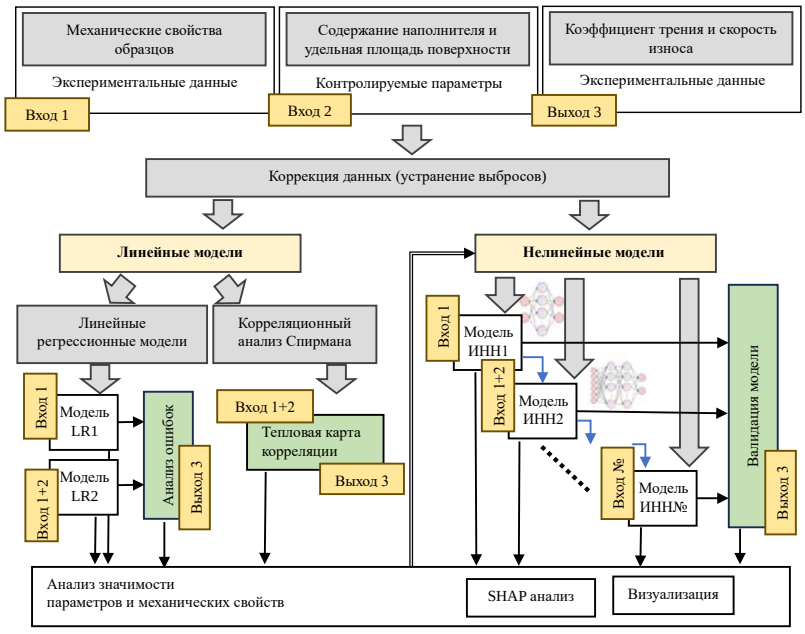


Рисунок – Блок схема алгоритма нейросетевого моделирования

Проект FWRW-2021-0010

ИФПМ СО РАН

РАЗВИТИЕ α′→α″ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В ПРОЦЕССЕ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ СВАРКИ ОБРАЗЦОВ 3D-НАПЕЧАТАННЫХ ТИТАНОВЫХ СПЛАВОВ ВТ6 И ВТ16

О.Б. Перевалова, А.В. Панин, М.С. Казаченок

Perevalova, O.B., Panin, A.V., Kazachenok, M.S. Formation of the α″-Phase in the Electron Beam Weld of α + β Dissimilar Titanium Alloys // Journal of Materials Engineering and Performance.- 2025.- P. 1-17 https://doi.org/10.1007/s11665-025-11616-5 Импакт-фактор журнала 2,0

Методами рентгеноструктурного анализа и просвечивающей электронной микроскопии впервые продемонстрировано развитие мартенситного α′→α″ фазового превращения в сварном шве 3D-напечатанных титановых сплавов ВТ6 (Ti-6Al-4V) и ВТ16 (Ti-3Al-5V-5Mo) Показано, что в процессе электронно-лучевой сварки сплавов ВТ6 и ВТ16, характеризующихся различным химическим составом имеет место интенсивное перемешивание легирующих элементов. Вследствие быстрого охлаждения сварочной ванны микроструктура сворного шва состоит из первичных β херен и пластин мартенситной α′ фазы, внутри которой выделяются двойниковые кристаллы α″ фазы. Представленные результаты являют наглядным доказательством возможности образования мартенситной орторомбической α″ фазы в процессе 3D печати изделий из α+β титановых сплавов.

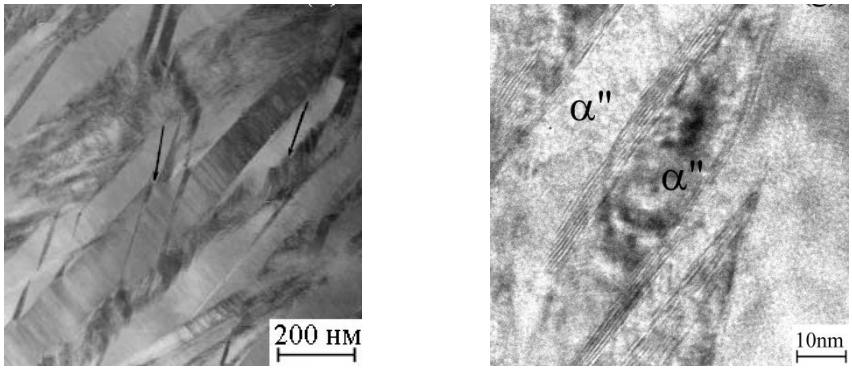


Рисунок – Электронно-микроскопические изображения микроструктуры сварного шва 3D-напечатанных образцов титановых сплавов ВТ6 и ВТ16

Проект FWRW-2021-0010

ИФПМ СО РАН

ПОВЫШЕНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ И ТРИБОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОКРЫТИЙ TI-AL-TA-SI-N ПУТЕМ ОПТИМИЗАЦИИ НАПРЯЖЕНИЯ СМЕЩЕНИЯ НА ПОДЛОЖКЕ

А.Р. Шугуров, А.В. Панин, Е.Д. Кузьминов

A.R. Shugurov, E.D. Kuzminov, A.V. Panin. The effect of substrate bias on the structure, mechanical and tribological properties of DC magnetron sputtered Ti-Al-Ta-Si-N coatings // Surf. Coat. Technol. 517 (2025) 132858 https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2025.132858
Импакт-фактор журнала 6,1

Предложен метод улучшения физических и трибологических характеристик покрытий Ti-Al-Ta-Si-N, нанесенных методом магнетронного распыления, путем оптимизации напряжения смещения, приложенного к подложке. Показано, что увеличение напряжения смещения на подложке от -40 до -200 В приводит к росту содержания Ta и Si в покрытиях и снижению содержания Al. При этом микроструктура покрытий изменяется от столбчатой к плотной нанокомпозитной структуре. Установлено, что покрытие, осажденное при напряжении -80 В, характеризуется оптимальным сочетанием высокой твердости и сниженного модуля упругости, что обеспечивает его повышенную адгезию и износостойкость. Полученные результаты продемонстрировали возможность эффективного управления структурой и свойствами покрытий Ti-Al-Ta-Si-N путем варьирования смещения, приложенного к подложке.

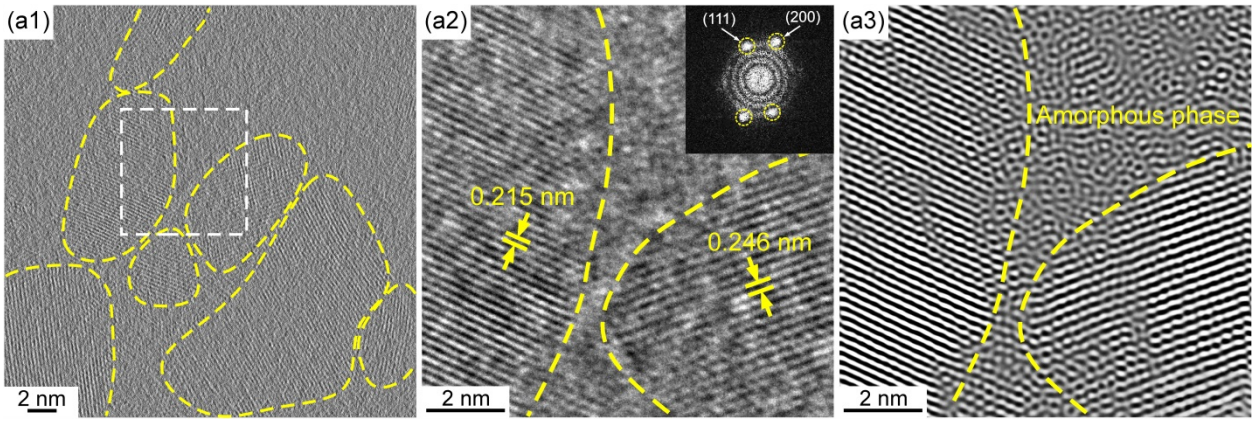


Рисунок –Микроструктура покрытий Ti-Al-Ta-Si-N, полученных методом магнетронного распыления при напряжении смещения -80 В

Проект FWRW-2021-0011

ИФПМ СО РАН

АВТОВОЛНОВАЯ ТЕОРИЯ ПЛАСТИЧНОСТИ МАТЕРИАЛОВ

Л.Б. Зуев (3822-491-360, lbz@ispms.ru), **Ю.А. Хон** (3822-286-824, khon@ispms.ru)

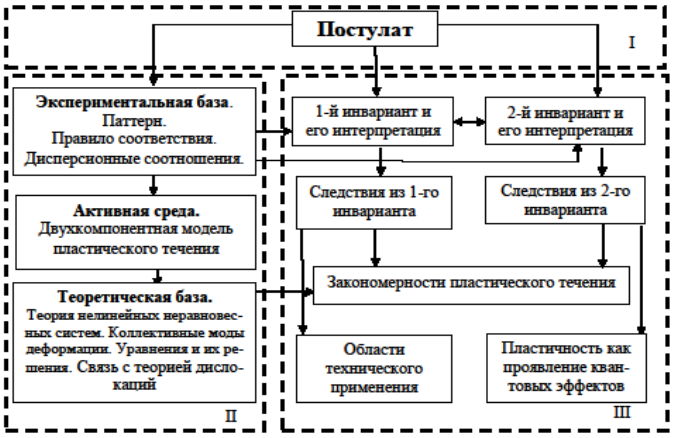
Опубликовано:
1. Зуев Л.Б. Двухкомпонентная модель автоволновой пластичности. Макромасштаб и инварианты пластической деформации//ФТТ. – 2025. –Т. 67. – № 6. – С. 1046-1051. DOI: 10.61011/FTT.2025.06.60954.114-25
2. Zuev L.B., Khon Yu.A. Autowave physics of inhomogeneous plastic flow // Phys. Mesomech. – 2025. – Vol. 28. – No. 1. - P. 1–26. DOI: 10.1134/S1029959924601325

Предложена аксиоматическая формулировка автоволновой теории пластичности, основанная на постулате: «пластическая деформация развивается макроскопически локализованным образом. Произведение размера области локализации на скорость ее движения V_{aw} связано с произведением межплоскостного расстояния на скорость поперечных упругих волн V_t соотношением

$$\left(\frac{h}{\lambda V_{aw}} - \frac{h}{\chi V_t}\right) = \alpha,$$

в котором h – постоянная Планка, а - атомная единица массы».

Блок-схема автоволновой теории пластичности, представленная на рисунке, поясняет связи между разделами автоволновой теории.



В рамках развитой автоволновой теории показано, что в основе процесса пластического течения лежат явления самоорганизации дефектной структуры деформируемой среды, проявляющиеся как процессы генерации автоволн локализованной пластичности. Установлена связь дислокационных и макроскопических масштабов явлений, ответственных за пластическую деформацию. Найдены решения нелинейных уравнений пластического течения, полученные с учетом неравновесности и активности деформируемой среды и описывающие все стадии процессе деформации. Основными уравнениями автоволновой теории являются упругопластический (1-й) и массовый (2-й) инварианты процесса пластического течения, которые следуют из постулата о развитии пластичности. Получены следствия из инвариантов, которые объясняют природу основных закономерностей феномена пластичности для разных материалов и режимов нагружения.

Проект FWRW-2022-0001

ИФПМ СО РАН

ФОРМИРОВАНИЕ ГЕРМАНЕНА ПУТЁМ ИНТЕРКАЛЯЦИИ МАГНИТНЫХ АТОМОВ НА ПОВЕРХНОСТЬ Ge(111) И ИЗУЧЕНИЕ ЕГО ЭЛЕКТРОННОЙ И МАГНИТНОЙ СТРУКТУРЫ

С.В. Еремеев (+7-953-921-88-18, eremeev@ispms.ru)

Публикация: A.V. Matetskiy, A. Barla, P. Moras, C. Carbone, V. Milotti, C.A. Brondin, Z.R. Benher, M. Holub, P. Ohresser, E. Otero, F. Choueikani, I.A. Shvets, A.N. Mihalyuk, S.V. Eremeev, P.M. Sheverdyaeva, Germanene-based two-dimensional magnet with tunable properties, ACS Nano – 2025. – Vol. 19. – P. 20863–20870.
DOI: 10.1021/acsnano.5c03331, импакт-фактор 16.1

Формирования магнитного порядка в двумерных дираковских системах представляет большой интерес как с фундаментальной, так и с практической точек зрения. В настоящей работе было проведено исследование индуцирования магнетизма в германене, полученного путём интеркаляции поверхности германия (111) атомами гадолиния, и показано что в такой системе реализуется неколлинеарный антиферромагнитный порядок. В отличие от свободного германена, где щель в дираковском состоянии имеет спин-орбитальный характер, в германене интеркалированном магнитными атомами она в несколько раз больше за счёт вклада Gd-*d* орбиталей, при этом сингулярности спиновой кривизны Берри в K(K′)-точках выживают. Было показано теоретически, что электронное допирование, индуцированное осаждением цезия, приводит не только к сдвигу уровня Ферми, но также переводит систему в ферромагнитное состояние, а затем обратно в неколлинеарный антиферромагнетик в пределе насыщенного монослоя цезия. Мы предполагаем, что эта система может найти применение в магнитоэлектронике и спинтронике.

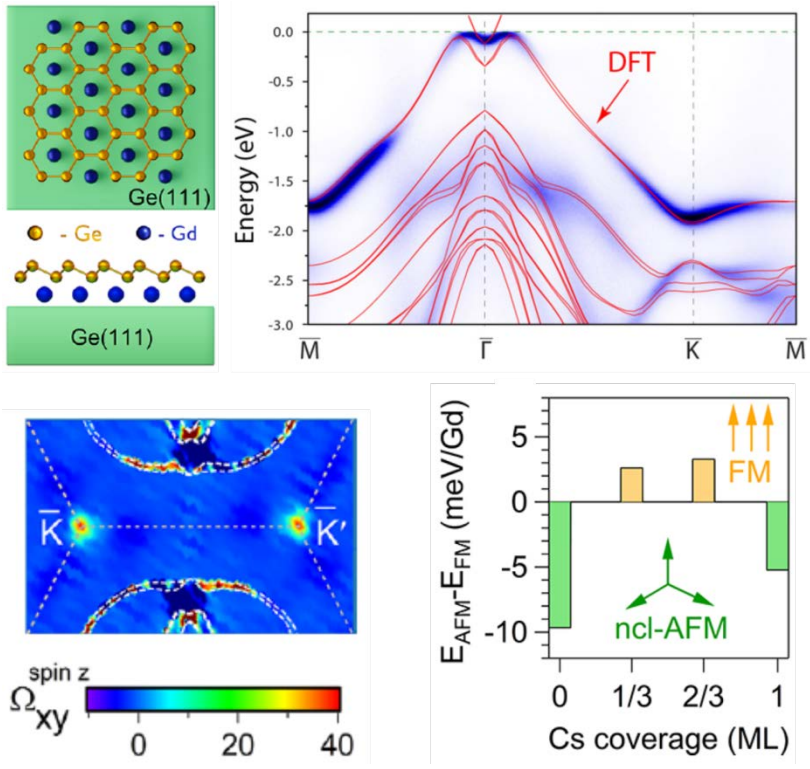


Рисунок – Атомная и электронная (ARPES и DFT расчёт) структура GdGe2, карта спиновой кривизны Берри в окрестности дираковских состояний в K(K′) и зависимость магнитного порядка от электронного допирования.

Проект FWRW-2022-0001

ИФПМ СО РАН

ПОИСК ТРОЙНЫХ СПЛАВОВ ТИТАНА СОСТАВА XY_3Ti_{11} С НИЗКИМИ ЗНАЧЕНИЯМИ МОДУЛЯ ЮНГА

С.Е. Кулькова (+7-3822-286-952, kulkova@ispms.ru), **А.В. Бакулин** (+7-3822-286-952, bakulin@ispms.ru)

Публикации: S.O. Kasparyan, A.E. Ordabaev, A.V. Bakulin, S.E. Kulkova, Mechanical and electronic properties of ternary alloys XY_3Ti_{11}, Russ. Phys. J. – 2025. – Vol. 68, No. 3. – P. 434–443. DOI: 10.1007/s11182-025-03450-y, импакт-фактор 0.66.
S.O. Kasparyan, A.E. Ordabaev, A.V. Bakulin, S.E. Kulkova, Elastic and thermal properties of some ternary β-Ti based alloys, Nanosystems: Phys. Chem. Math. – 2025. – Vol. 16, No. 2. – P. 225–234. DOI: 10.17586/2220-8054-2025-16-2-225-234, импакт-фактор 0.92.

Проведен целенаправленный поиск тройных титановых сплавов XY_3Ti_{11} с низкими значениями модуля Юнга с использованием модели «кластер плюс атом клея». Показано, что в случае простых (In, Sn) и переходных (IVB–VIB) металлов на X и Y позициях сплавы VNb_3Ti_{11}, $MoTa_3Ti_{11}$, $InHf_3Ti_{11}$ и $SnHf_3Ti_{11}$ обнаруживают поликристаллический модуль Юнга менее 45 ГПа. Установлено, что низкие значения модуля Юнга коррелируют с меньшей прочностью связи X–Ti в титановом кластере в случае сплавов с переходными металлами на X и Y позициях, а в сплавах с In, Sn и переходными металлами – с прочностью связи Y–Ti. Показано, что наименьшие значения модуля Юнга в тройных сплавах титана состава XY_3Ti_{11} соответствуют направлению <100>, а влияние *s,p*-элементов на модуль Юнга менее выражено по сравнению с переходными металлами. Впервые показано, что разупорядочение ведет к увеличению модуля Юнга в изученных сплавах, но его значения остаются меньше, чем у чистого титана или сплава Ti-6Al-4V. Проведенные расчеты способствуют более эффективному поиску низкомодульных сплавов титана. На рисунке приведены модули Юнга в изученных сериях сплавов $In(Sn)Y_3Ti_{11}$ (а) и $XIn(Sn)_3Ti_{11}$ (б) и вдоль направления <*ijk*>, а также дан 3D вид поверхности для модуля Юнга для сплавов InY_3Ti_{11} и XIn_3Ti_{11}.

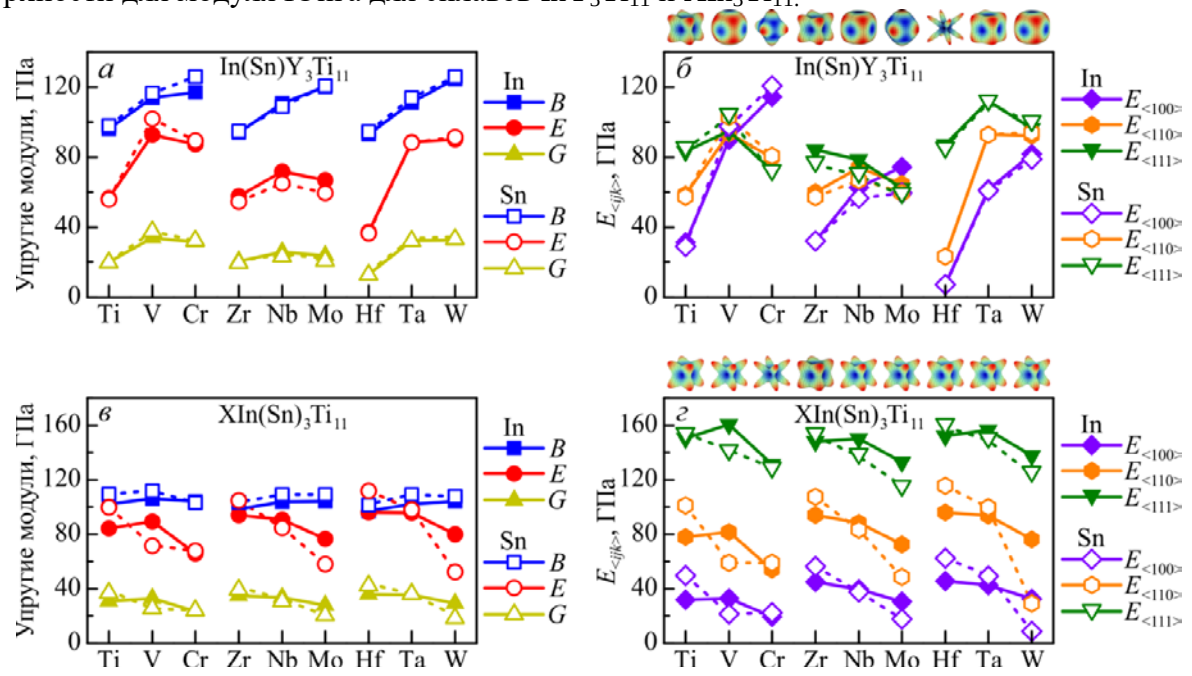


Рисунок – Упругие модули и модуль Юнга вдоль направления <*ijk*> в сериях сплавов XY_3Ti_{11}, а также 3D вид поверхности для модуля Юнга для сплавов InY_3Ti_{11} и XIn_3Ti_{11}.

Проект FWRW-2022-0002

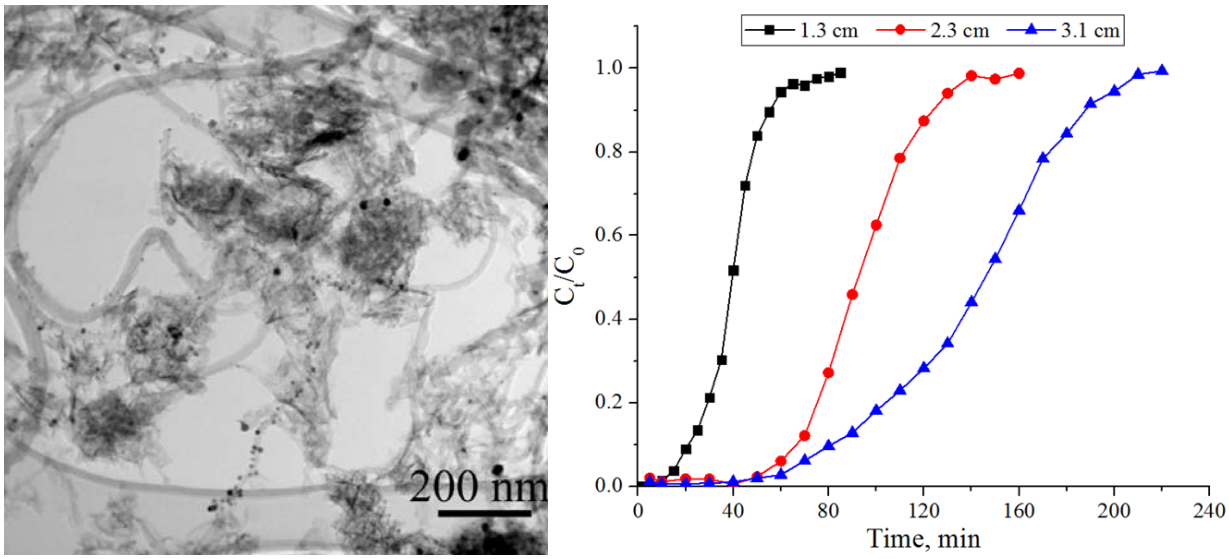
ИФПМ СО РАН

КОМПОЗИЦИОННЫЕ НАНОСТРУКТУРЫЕ АДСОРБЕНТЫ ДЛЯ ОЧИСТКИ ВОДЫ

С.О. Казанцев[1] (+7-3822-286-965, kzso@ispms.ru), **А.С. Ложкомоев** (+7-3822-286-965, asl@ispms.ru)

Публикация: Kazantsev S.O. Lozhkomoev A.S. Kinetic Analysis of Characteristics of an Adsorption Column for Water Purification Based on AlOOH/MWCNTs/Ag Composites // international journal of environmental science and technology. – 2025 (*в редакции*). Q1, IF 3,4.

Впервые изучена адсорбция органических молекул в динамических условиях на композиционном адсорбенте, представляющем собой смесь многостенных углеродных нанотрубок и нанолистов бемита, декорированных наночастицами серебра. Экспериментальные данные по адсорбции красителей продемонстрировали достаточную эффективность их удаления из воды. Показано, что нелинейный регрессионный анализ может быть использован для оптимизации адсорбции с учетом высоты слоя композита, скорости потока и начальной концентрации красителя.



а б

Рисунок – Изображение наноструктурного композита (а) и типичные кривые адсорбции в динамических условиях при пропускании красителя через слой адсорбента различной высоты

Проект FWRW-2022-0002

ИФПМ СО РАН

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ КОЭФФИЦИЕНТА ОПТИЧЕСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ КОМПОЗИТНОЙ КЕРАМИКИ НА ОСНОВЕ ГИДРОКСИАПАТИТА

А.Н. Пономарев (+79069490071, alex@ispms.ru), А.Е. Резванова (+79527559781, ranast@ispms.ru), Б.С. Кудряшов (+79610962460, bsk3@ispms.ru)

Публикация: A.E. Rezvanova, B.S. Kudryashov, A.N. Ponomarev. Application of machine learning methods to predict the optical absorption coefficient of composite ceramics based on hydroxyapatite // Technical Physics. – 2025. – Т. 70. – №. 5. – С. 826-833.

Разработан алгоритм для прогнозирования коэффициента оптического поглощения керамических материалов на основе гидроксиапатита (ГА) с добавками многостенных углеродных нанотрубок (МУНТ). Численное моделирование охватило диапазон концентраций МУНТ от 0 до 0,5 мас. % и позволило выявить как качественные, так и количественные зависимости коэффициента поглощения от частоты излучения при варьировании концентрации нанотрубок. Для анализа данных были апробированы ключевые методы машинного обучения: полиномиальная регрессия, адаптивный бустинг и искусственные нейронные сети. В рамках тестирования нейронной сети проведено сравнение эффективности обучения на нормализованных и ненормализованных данных, которое показало, что нормализация приводит к существенному снижению точности модели. Оценка качества моделей выполнялась по метрике средней абсолютной ошибки в процентах, где среди всех методов наилучший результат продемонстрировала нейронная сеть со значением 0,049 %, что подтверждает высокую точность прогнозирования (рис.1). Таким образом, применение методов машинного обучения не только обеспечило эффективный анализ поведения материалов, но и позволило с высокой точностью прогнозировать коэффициент оптического поглощения в керамических композитах на основе ГА с заданным содержанием МУНТ. Полученные результаты открывают перспективы целенаправленного регулирования оптических характеристик композитов путём варьирования концентрации МУНТ. Это создаёт научную основу для разработки новых функциональных материалов с заданными оптическими свойствами, что имеет существенное практическое значение для биомедицины, радиоэлектроники и других высокотехнологичных отраслей.

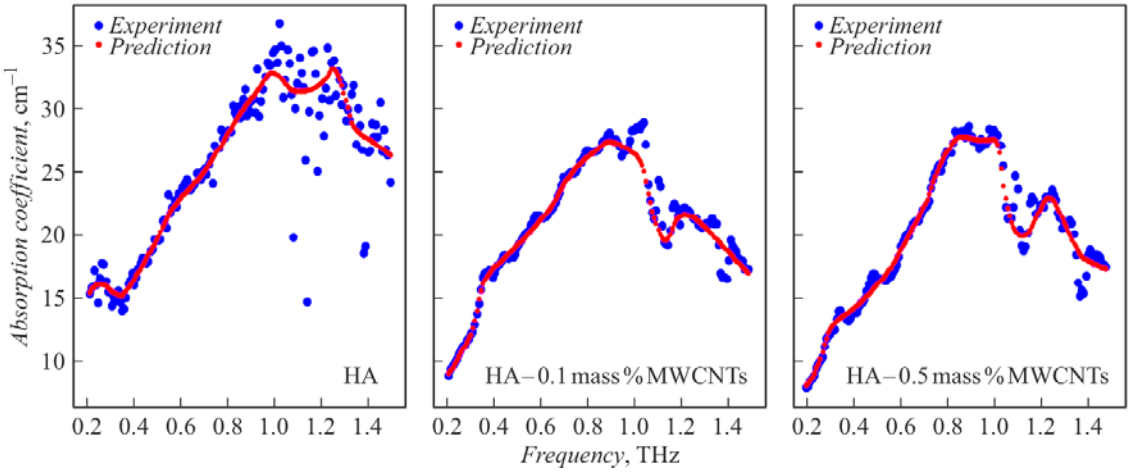


Рисунок – прогнозирование зависимости коэффициента поглощения от частоты излучения композитной керамики ГА–МУНТ при концентрации трубок до 0.5 масс.%.

Проект FWRW-2022-0002

ИФПМ СО РАН

ВЛИЯНИЕ ДЕФЕКТОВ СТОУНА-УЭЛЬСА И ДЕФОРМАЦИИ КРУЧЕНИЯ НА КИСЛОРОДНУЮ ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЮ МНОГОСТЕННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Н.Г. Бобенко[1] (+79234087186, nlitvin86@mail.ru), **В.Е. Егорушкин**[2] (+79138641280, val110@mail.ru)

Публикация:
Бобенко Н. Г., Шунаев В. В., Егорушкин В. Е., Глухова О. Е., Влияние дефектов Стоуна-Уэльса и деформации кручения на кислородную функционализацию МУНТ // Химическая физика и мезоскопия. – 2025.- Т. 27. - ,№ 2. –С. 134-143.

В рамках исследования методом SCC DFTB установлено влияние азотирования, дефектов Стоуна-Уэльса и деформации кручения на кислородную функционализацию многостенных углеродных нанотрубок (МУНТ). В деформированных МУНТ выявлено, что заряд локализуется вблизи дефектов Стоуна-Уэльса, плотность электронных состояний на уровне Ферми увеличивается, а величина уровня Ферми уменьшается. Кручение снижает энергетические барьеры карбоксильной функционализации с 0.14 до 0.10 эВ/атом и способствует безбарьерному присоединению гидроксильных групп к карбонильным. Полученные данные демонстрируют, что деформированные структуры МУНТ обладают повышенной реакционной способностью, что делает их перспективными кандидатами для применения в электрохимии, катализе и биомедицинских наноматериалах. Эти результаты способствуют расширению фундаментальных представлений о механизмах функционализации углеродных наноматериалов и могут служить основой для разработки новых материалов с управляемыми свойствами.

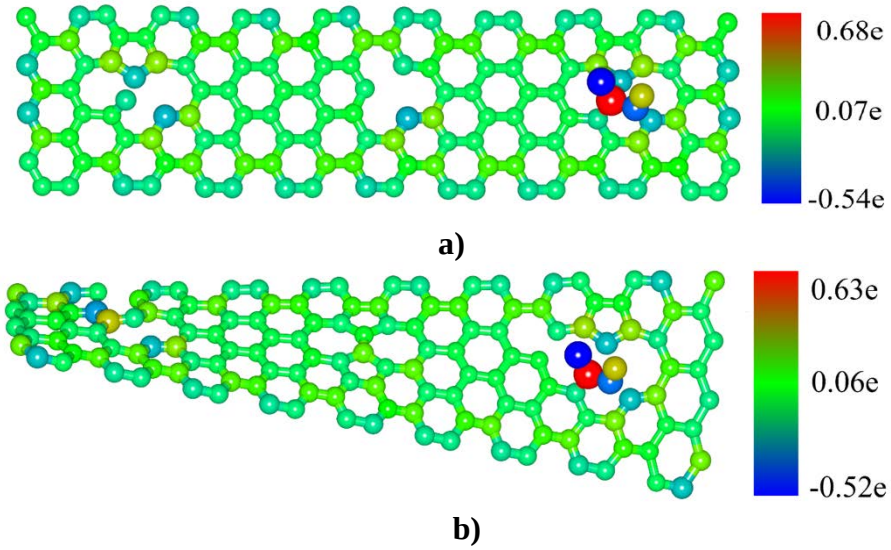


Рисунок – картина перераспределения заряда на атомах исходной (a) и торсионно деформированной функционализированной МУНТ (b). Знак «минус» на цветовой шкале соответствует избытку электронов.

Проект FWRW-2022-0003

ИФПМ СО РАН

ОСОБЕННОСТИ ОКИСЛЕНИЯ ДВУХФАЗНОГО СПЛАВА Ti-Al ВСЛЕДСТВИЕ ДИФФУЗИИ КИСЛОРОДА ПО ГРАНИЦАМ ЗЕРЕН

А.Г. Князева (+73822286831, anna-knyazeva@mail.ru), **М.В. Чепак-Гизбрехт** (+73822286810, mv2016@ispms.ru)

Публикация: Chepak-Gizbrekht M.V., Knyazeva A.G. Oxidation of two-phase Ti-Al alloy due to grain boundary oxygen diffusion // Surfaces and Interfaces. 2025. Vol. 72, Article 107316. P. 1–11. – DOI: 10.1016/j.surfin.2025.107316, Impact Factor 6.3, Q1

Для исследования динамики окисления сплавов с различной зеренной структурой предложена двумерная модель, учитывающая диффузию атомарного кислорода по границам зерен и в объеме зерен с различной скоростью и окисление в смешанном диффузионно-кинетическом режиме с детальной схемой химических реакций. Выявлено, что наибольшее интегральное количество кислорода и оксидов наблюдается в сплаве смешанного состава, включающего как зерна TiAl, так и зерна Ti_3Al. Преобладание в поверхностном слое оксидов титана, полученное в численном эксперименте, соответствует известным экспериментальным данным. Результаты могут представлять интерес для объяснения экспериментально наблюдаемых закономерностей. Модель может быть модифицирована применительно к сплавам иного состава, например, содержащим легирующие элементы (Si, Mo, Nb), которые влияют на динамику окисления, для сплавов Ti-Ni, Fe-Ti, Al-Ni и др.

Подобный подход применим и для таких широко распространенных процессов как азотирование и наводороживание.

Повторяющийся элемент двухфазной структуры; *G*1 – TiAl; *G*2 – Ti_3Al; *B* – область, занятая граничной фазой (область влияния межзеренных границ)

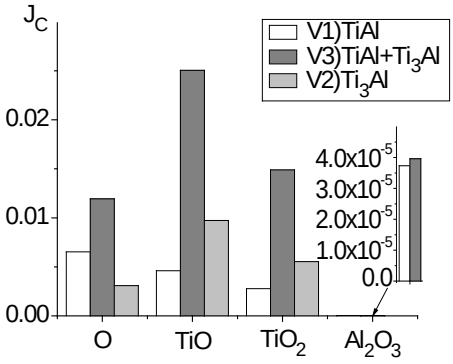


Диаграмма соотношения концентраций кислорода и оксидов в образцах различного состава за время наблюдения J_C – интегральная массовая концентрация

Проект FWRW-2022-0003

ИФПМ СО РАН

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПРОЦЕССА СОЗДАНИЯ СЛОЕВОГО КОМПОЗИТА

А.Г. Князева (+73822286831, anna-knyazeva@mail.ru)

Публикация: Knyazeva A.G. Energetic characteristics of the process of layered composite creation in the model of sheet lamination technology with reactive adhesive layer // Lobachevskii Journal of Mathematics. 2025. Vol. 46, No. 6. P. 2837–2851. – DOI: 10.1134/S1995080225608185, Impact Factor N/A, Q2

Для изучения физико-химических процессов, происходящих в соединительном составе при синтезе слоистого композита, предложена двумерная модель, в которой предполагается, что процесс формирования продукта в клеевом слое сопровождается структурообразованием, которое описывается как обратимая химическая реакция. Модель дополнена расчетом энергетических характеристик: суммарного выделения тепла при химической реакции, запаса тепла в прогретом слое, избытка энтальпии, максимального значения теплового потока из зоны реакции в направлении движения ролла и др. Эти характеристики, а также производство энтропии полезны для выявления возможных режимов превращения. Показана важная роль технологических параметров, учтенных в модели, от которых зависят характер и динамика распределения температуры, а также динамика накопления продукта, итоговая степень превращения и степень структуризации.

Подобный подход применим к анализу иных технологических процессов.

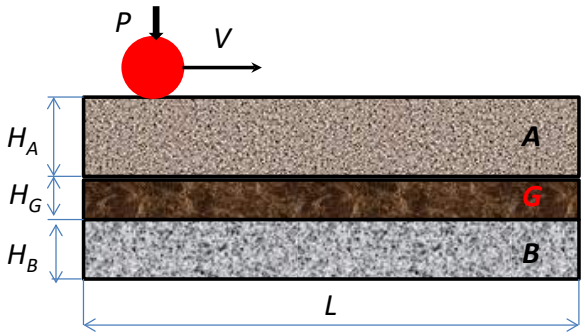
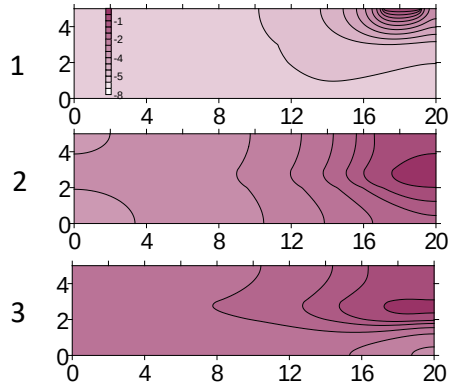


Схема процесса.

$$\theta = \frac{(T - T_S)E}{RT_S^2}$$

T_S – температура ролла; E – энергия активации экзотермической реакции в клеевом слое



Распределения температуры θ в композите в последовательные моменты времени: ролл покидает образец (1); реакция начинается в прогретом образце (2); фронт реакции бежит в сторону, противоположную направлению движения ролла (3)

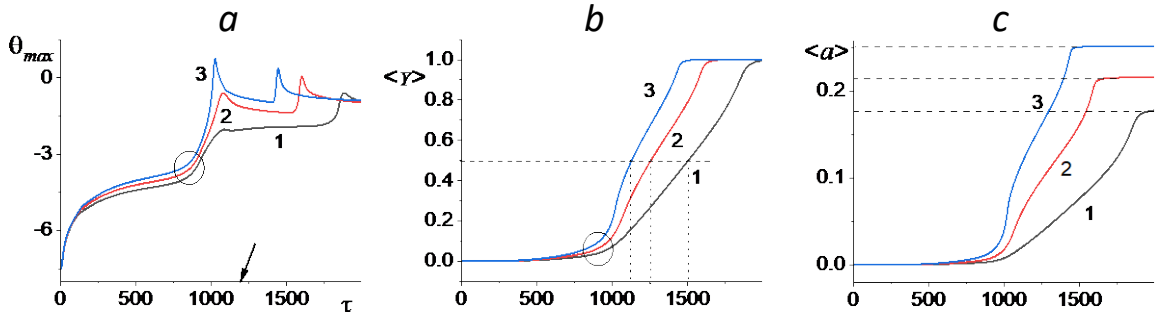


Рисунок – Максимальная температура (a); среднеинтегральная степень превращения (b) и среднеинтегральная степень структуризации (c)

Проект FWRW-2022-0004

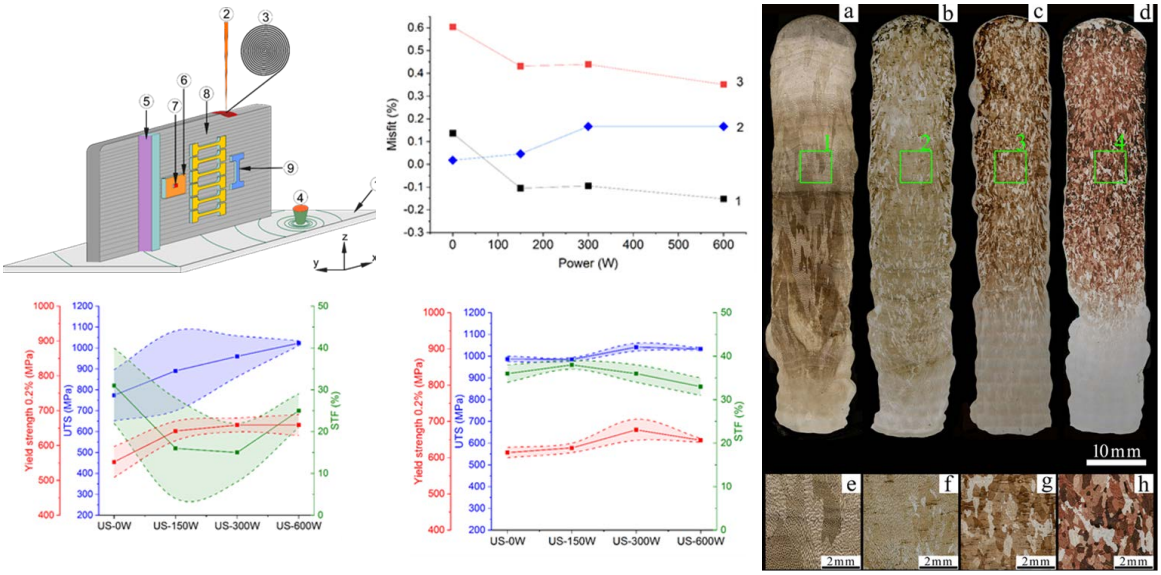
ИФПМ СО РАН

ИЗМЕЛЬЧЕНИЕ ЗЕРЕН И ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕМЕНТОВ В ХОДЕ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОГО АДДИТИВНОГО ПРОИЗВОДСТВА НИКЕЛЕВОГО СУПЕРСПЛАВА UDIMET 500 С ПРИМЕНЕНИЕМ УЛЬТРАЗВУКА

А.В. Воронцов, (+7-983-239-34-17, vav@ispms.ru)

Публикация: doi/10.1016/j.jallcom.2025.179474 (Q1)

Коллектив сотрудников лабораторий структурного дизайна перспективных материалов, локальной металлургии в аддитивных технологиях и физики упрочнения поверхности ИФПМ СО РАН исследовал сплав Udimet 500, полученный методом электронно-лучевого аддитивного производства, ассистированного ультразвуковым воздействием. Ультразвуковые колебания с уровнями мощности 0, 150, 300 и 600 Вт передавались через сонотрод, закрепленный на подложке из нержавеющей стали, что позволило снизить степень анизотропии. Образцы состояли из γ-твердого раствора и как крупных (>100 нм), так и мелких (<100 нм) γ′-частиц вместе с карбидами (Ti,Mo)C и TiC, диспергированными в γ-матрице. Обработка ультразвуком привела к измельчению первичных γ-зерен, устранению кубической текстурной составляющей и преобразованию карбидов TiC в карбиды (Ti,Mo)C. Обработка ультразвуком при 600 Вт позволила получить превосходный баланс между прочностью и пластичностью в Udimet 500 благодаря улучшенной однородности и измельчению зерен γ/γ′.



Проект FWRW-2022-0005

ИФПМ СО РАН

ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИЕ СПЛАВЫ Ti-Fe, ПОЛУЧЕННЫЕ МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОГО АДДИТИВНОГО ПРОИЗВОДСТВА

Е.А. Колубаев (eak@ispms.ru), **С.В. Астафуров** (svastafurov@ispms.ru), **Л.В. Данилова** (dlv@ispms.ru)**, Е.Г. Астафурова** (elena.g.astafurova@ispms.ru)

Публикация: E. Astafurova, L. Danilova, A. Nifontov, A. Luchin, S. Astafurov, E. Kolubaev. Intermetallic Fe–Ti alloy obtained by dual-wire electron-beam additive manufacturing // Next Materials 8 (2025) 100739. https://doi.org/10.1016/j.nxmate.2025.100739 (импакт-фактор журнала – 0,671, Q1),

Разработаны физические принципы получения интерметаллического сплава системы Ti-Fe, используемого в качестве накопителя водорода. Впервые был продемонстрирован научно обоснованный подход к формированию «*in situ*» интерметаллических объемных заготовок сплава Ti-Fe методом двухпроволочного электронно-лучевого аддитивного производства (ЭЛАП). Перспектива практического использования предложенного подхода основана на том, что для формирования объемных интерметаллических заготовок в едином производственном цикле ЭЛАП, были использованы доступные материалы: промышленные проволоки малоуглеродистой стали и титана.

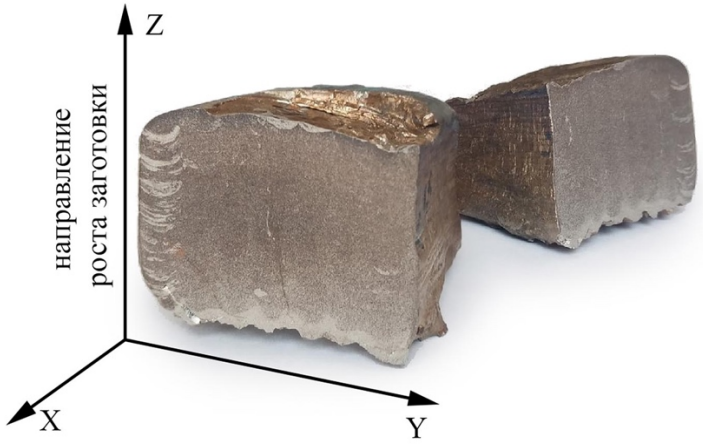


Рисунок – Общий вид заготовки интерметаллического сплава системы Fe–Ti, полученной методом ЭЛАП (заготовка разрезана по центру)

Проект FWRW-2024-0001

(ИФПМ СО РАН

МЕХАНИЗМЫ УПРОЧНЕНИЯ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СПЛАВОВ Cu(Al)/Fe(Cr,Ni), ПОЛУЧЕННЫХ ДВУХПРОВОЛОЧНОЙ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ АДДИТИВНОЙ ТЕХНОЛОГИЕЙ

А. О. Панфилов (panfilov@ispms.ru), **А. А. Зыкова** (zykovaap@mail.ru), **Д. А. Гурьянов** (desa-93@mail.ru), **Н. Л. Савченко** (savnick@ispms.tsc.ru), **Е. А. Колубаев** (eak@ispms.ru), **А. В. Воронцов** (vav@ispms.ru)

A. Zykova, A. Panfilov, A. Nikolaeva, D. Gurianov, N. Savchenko, S. Tarasov, E. Kolubaev. Strengthening mechanisms for multicomponent Cu(Al)/Fe(Cr,Ni) alloys produced via dual-wire electron beam additive manufacturing // Physica B: Condensed Matter – 2025. – Vol. 718. – P. 417884. https://doi.org/10.1016/j.physb.2025.417884 (Q2, Impact factor 2.8).

Установлено, что в многосоставных сплавах системы Cu(Al)/Fe(Cr,Ni) с содержанием Fe(Cr,Ni)-фазы 10, 25 и 50 об.% реализуются различные механизмы упрочнения, определяемые фазовым составом и морфологией выделений. При 10 об.% стали доминирующим механизмом является зернограничное упрочнение (вклад +221 МПа), обусловленное высокой плотностью межфазных границ между матрицей α-Cu(Al) и дисперсными включениями α-Fe(Cr). При увеличении содержания стали до 25 об.% сохраняется значительный вклад зернограничного упрочнения (+181 МПа), однако возрастает роль дисперсионного упрочнения за счёт выделений Cu_3Al в фазе α-Fe. В сплаве с 50 об.% стали основным механизмом становится твердорастворное упрочнение (+264 МПа) вследствие высокой концентрации Cr, Ni и Al в обеих матрицах: α-Cu и α-Fe, а также формируются сложные частицы с ядром Cu_3Al и оболочкой NiAl, дополнительно повышающие прочность. В результате предел текучести возрастает с 296 МПа (10 об.%) до 561 МПа (50 об.%), а предел прочности с 626 до 818 МПа при снижении относительного удлинения на 18 %. Полученные данные демонстрируют возможность целенаправленного управления механизмами упрочнения в гетерофазных аддитивных сплавах за счёт регулирования соотношения компонентов.

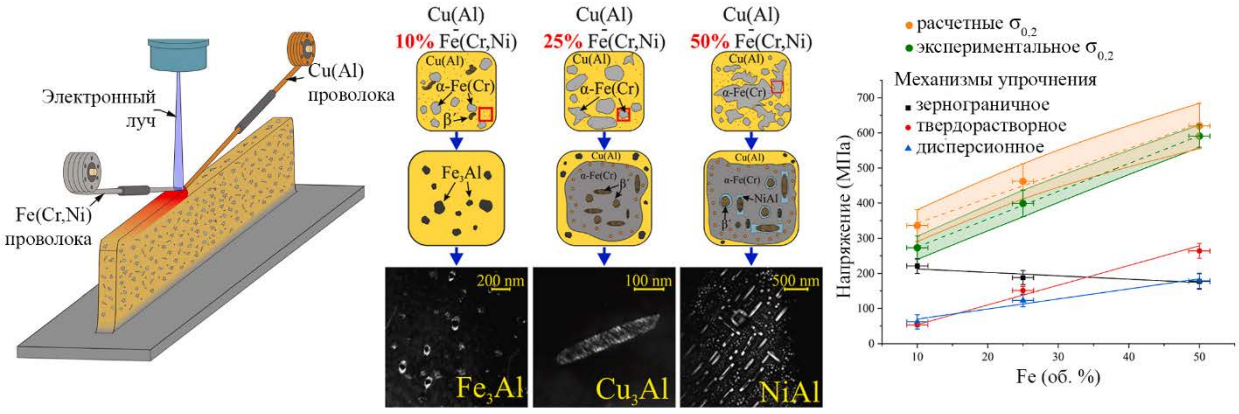


Рисунок – Схема двухпроводочного электронно-лучевого аддитивного производства, микроструктура многокомпонентных сплавов и зависимость механизмов упрочнения от содержания Fe(Cr,Ni) в многокомпонентных сплавах системы Cu(Al)/Fe(Cr,Ni).